

Ladungstransport in festphasenkristallisiertem polykristallinem Silizium

vorgelegt von

Diplom-Physiker
Lars-Peter Scheller

aus Berlin

von der Fakultät II - Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Naturwissenschaften
- Dr. rer. nat. -

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. Michael Lehmann
Erstgutachter: Prof. Dr. Norbert H. Nickel
Zweitgutachter: Prof. Dr. Michael Kneissl
Drittgutachter: Prof. Dr. W. Ted Masselink

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 08.02.2011

Berlin 2011

D 83

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Experimentelle Methoden	9
2.1	Probenpräparation	9
2.2	Charakterisierungsmethoden	11
3	Ergebnisse	17
3.1	Strukturelle Eigenschaften	18
3.2	Elektrischer Transport	25
3.3	Defektcharakterisierung	45
3.4	Wasserstoffpassivierung	56
4	Diskussion	73
4.1	Strukturelle Verspannungen	74
4.2	Ladungstransport und Defekte	80
5	Zusammenfassung	123
	Literaturverzeichnis	125
	Veröffentlichungen und Konferenzbeiträge	149
	Wissenschaftlicher Werdegang	151
	Danksagung	153

1 Einleitung

Polykristallines Silizium (poly-Si) ist im Gegensatz zu einkristallinem Silizium (c-Si) ein heterogenes Material bestehend aus verschiedenen großen und unterschiedlich orientierten Kristalliten. Die Gitterfehlانpassung in den als Korngrenzen bezeichneten Bereichen zwischen den Kristalliten führt zur Entstehung einer Reihe kristallographischer Defekte wie Fehlstellen, verspannten und gebrochenen Bindungen sowie Versetzungen [1, 2]. Zusätzlich neigen auch extrinsische Verunreinigungen dazu, zu den Korngrenzen zu diffundieren und sich dort anzusammeln [3–5]. Viele dieser Defekte bzw. Verunreinigungen besitzen energetische Zustände in der Bandlücke von c-Si und wirken sich folglich negativ auf die elektronische und optische Qualität des Materials aus [6].

Aufgrund großer Fortschritte im Verständnis der Struktur und der Eigenschaften von Korngrenzen [1, 2, 7] sowie ihrer Passivierung mit Hilfe von Wasserstoff [8–10] hat sich poly-Si in den letzten Jahrzehnten dennoch zu einem attraktiven Material für die Herstellung elektronischer Bauelemente entwickelt. Anwendung findet poly-Si heute u.a. als Widerstand bzw. leitende Verbindung in integrierten Schaltkreisen [11], als aktiver Halbleiter in Dünnschichttransistoren („thin film transistors“, TFTs) für Flüssigkristallbildschirme („liquid crystal displays“, LCDs) [12–14] sowie als optisch aktives Material in der Dünnschichtphotovoltaik [15–17]. Ungeachtet der großen technologischen Fortschritte stellt die inhomogene Natur des Materials mit der Vielzahl an Defekten aber auch heute noch den entscheidenden limitierenden Faktor für die Leistungsfähigkeit vieler auf poly-Si basierender Bauelemente dar.

Zur Herstellung von poly-Si Schichten auf Substraten existieren eine Reihe unterschiedlicher Methoden [17]. Mit diesen werden die polykristallinen Schichten entweder direkt gewachsen oder zunächst amorph abgeschieden und dann in einem zweiten Schritt kristallisiert. Zu den am häufigsten verwendeten Depositionsverfahren gehören die physikalische Gasphasenabscheidung („physical vapour deposition“, PVD) z.B. mittels Elektronenstrahlverdampfung, verschiedene Formen der chemischen Gasphasenabscheidung („chemical vapour deposition“, CVD) sowie das Sputtern [18, 19]. Für die nachträgliche Kristallisation amorpher Si-Schichten (a-Si) kommen Verfahren wie

die Festphasenkristallisation [20, 21], die Elektronenstrahlkristallisation [22], die Laserkristallisation [23] und die metallinduzierte Kristallisation [24] zum Einsatz. Die zur Herstellung der in dieser Arbeit untersuchten poly-Si Schichten verwendete Kombination aus Elektronenstrahldeposition und Festphasenkristallisation zeichnet sich hierbei zum Einen durch eine hohe Depositionsrate und zum Anderen durch die gute Homogenität der resultierenden poly-Si Schichten aus [25].

Für die Interpretation der elektrischen Eigenschaften von poly-Si existieren eine Reihe verschiedener Modelle, mit deren Hilfe die experimentellen Transportdaten mehr oder weniger erfolgreich beschrieben werden können. Gemeinsam haben diese Modelle, dass sie von den Korngrenzen als wesentlicher Ursache für die häufig stark verminderte Leitfähigkeit von poly-Si im Vergleich zum entsprechenden einkristallinen Material ausgehen. Zur Beschreibung der starken Abhängigkeit der Leitfähigkeit polykristalliner Halbleiter von der Dotierung wurden im Wesentlichen zwei Modelle vorgeschlagen. Das Segregationsmodell erklärt die starke Variation der Leitfähigkeit mit der Diffusion von Dotieratomen zu den Korngrenzen, an denen die Dotanden eingefangen und elektrisch neutralisiert werden [26–28]. Das Ladungsträgereinfangmodell geht dagegen von einer homogenen Verteilung der Dotieratome im Material aus und erklärt die verminderte Leitfähigkeit mit einem Transport über Potentialbarrieren an den Korngrenzen, die durch den Einfang freier Ladungsträger aus den Körnern entstehen [29–33]. Obwohl beide Modelle die Dotierungsabhängigkeit der Leitfähigkeit von poly-Si gut beschreiben hat sich letztlich das Ladungsträgereinfangmodell durchgesetzt, da es im Gegensatz zum Segregationsmodell auch die aktivierte Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit sowie das experimentell beobachtete Beweglichkeitsminimum richtig vorhersagt. Qualitativ wurde das Ladungsträgereinfangmodell erstmals von Kamins [29] zur Beschreibung der Ladungsträgerbeweglichkeit in poly-Si angewendet. Wenige Jahre später lieferte Seto [30] dann auch eine quantitative Beschreibung des Modells. Aufgrund einer unvollständigen theoretischen Behandlung des Ladungszustandes der Korngrenzendefekte war diese allerdings auf kleine Körner bzw. geringe Korngrenzendefektdichten beschränkt. Baccarani *et al.* [31] erkannten diese Unzulänglichkeit in Setos Berechnungen und erweiterten daraufhin das Modell um die Möglichkeit einer nur teilweisen Besetzung der Korngrenzendefekte bei teilweiser Verarmung der Körner sowie auf eine kontinuierliche Defektverteilung an der Korngrenzen. In den folgenden Jahren wurde die theoretische Beschreibung des Modells dann von Lu *et al.* [34] weiter verfeinert und von Kwok und Ho [35] auf dreidimensionale Kornstrukturen ausgedehnt. Nachfolgende Untersuchungen

konzentrierten sich dann vorwiegend auf das von den Modellrechnungen abweichende Temperaturverhalten der Leitfähigkeit bei tiefen Temperaturen. Das thermisch nicht aktivierte Transportverhalten wurde hierbei u.a. dem Hopping-Transport über Defektzustände an den Korngrenzen [36,37], einem Durchtunneln der Potentialbarrieren [38] oder einer statistischen Verteilung von Barrierenhöhen [39] zugeschrieben.

Die jahrzehntelange intensive Forschung auf dem Gebiet polykristalliner Halbleiter hat zu einem grundlegenden Verständnis über Defekte und Transportmechanismen in poly-Si geführt. Die Vielzahl der in diesem Zusammenhang durchgeführten Experimente hat jedoch auch gezeigt, dass die Transporteigenschaften individueller poly-Si Schichten stark vom angewandten Herstellungsverfahren und den genauen Präparationsbedingungen abhängen. Verantwortlich hierfür sind sowohl strukturelle Unterschiede als auch extrinsische Verunreinigungen, die explizit für das im Speziellen betrachtete poly-Si Material analysiert werden müssen.

In der vorliegenden Arbeit werden festphasenkristallisierte poly-Si Schichten, die auf unterschiedlichen Substraten mittels Elektronenstrahldeposition abgeschieden wurden, hinsichtlich ihrer strukturellen Eigenschaften und der stattfindenden Transportprozesse untersucht. Im Anschluss an die Einleitung wird in Kapitel 2 zunächst die Herstellung der poly-Si Schichten vorgestellt und ein Überblick über die im Rahmen der Arbeit angewandten Charakterisierungsmethoden gegeben. Der darauf folgende Ergebnisteil gliedert sich thematisch in zwei Abschnitte. Der erste Teil in Kapitel 3.1 beschäftigt sich zunächst mit der Untersuchung der strukturellen Eigenschaften der poly-Si Filme mittels Raman- und Elektronenrückstreuungsbegleitenden Untersuchungen. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf der durch die Kristallisation verursachten Verspannung der Schichten, die mittels schichtdickenabhängiger Ramanmessungen genauer analysiert wird. Der zweite Teil widmet sich dann dem elektrischen Ladungstransport sowie den hierfür wesentlichen Defekten in den festphasenkristallisierten poly-Si Schichten. Hierzu werden in Kapitel 3.2 die Ergebnisse temperaturabhängiger Leitfähigkeits- und Halleffektmessungen sowohl im thermodynamischen Gleichgewicht als auch unter optischer Anregung vorgestellt. Hierbei zeigt sich, dass der Ladungstransport in festphasenkristallisierten poly-Si Filmen entscheidend vom verwendeten Substrat und der Depositionstemperatur des amorphen Ausgangsmaterials beeinflusst wird und zum Teil deutliche Ähnlichkeiten zum Transport in a-Si aufweist. Eine genauere Untersuchung der für die Transporteigenschaften polykristalliner Halbleiter in erster Linie verantwortlichen Defekte mittels verschiedener defektspektroskopischer Methoden erfolgt im Anschluss in Abschnitt

3.3. Im Mittelpunkt des letzten Abschnitts 3.4 steht dann die Auswirkung einer Wasserstoffpassivierung auf diese Defekte und die damit verbundenen Änderungen im Transportverhalten. Die sich an den Ergebnisteil anschließende Diskussion orientiert sich thematisch an dessen Gliederung. In Abschnitt 4.1 werden zunächst mögliche Ursachen für die beobachtete tensile Verspannung der poly-Si Schichten diskutiert. Hierbei wird insbesondere gezeigt, dass thermischer Stress aufgrund unterschiedlicher Ausdehnungskoeffizienten von Schicht und Substrat nicht die Hauptursache für die beobachtete starke Verspannung sein kann. Die tensile Verspannung an der Grenzfläche zum Substrat ist mit großer Wahrscheinlichkeit vielmehr eine Folge der mit dem Phasenübergang von a-Si zu poly-Si verbundenen Dichteänderung des Materials und somit ein parasitärer Effekt der Festphasenkristallisation. Die Analyse der experimentellen Transportdaten auf Grundlage bekannter Transportmodelle findet dann in Abschnitt 4.2 statt. Die Diskussion der Ergebnisse zeigt dabei, wie komplex das Wechselspiel zwischen Defekten, Wasserstoff und dem Ladungstransport in festphasenkristallisiertem poly-Si bzw. poly-Si im Allgemeinen ist und welche Rolle extrinsische Verunreinigungen spielen.

2 Experimentelle Methoden

Dieses Kapitel gibt einen Überblick über die im Rahmen der vorliegenden Arbeit angewandten experimentellen Methoden. In Abschnitt 2.1 wird die Herstellung der untersuchten polykristallinen Si-Schichten mittels Elektronenstrahldeposition und anschließender Festphasenkristallisation beschrieben. Zusätzlich wird kurz auf die ebenfalls durchgeführte Wasserstoffnachbehandlung der poly-Si Schichten eingegangen. In Abschnitt 2.2 werden die zur Charakterisierung der Schichten verwendeten Messmethoden vorgestellt. Hierbei erfolgt eine Gliederung in strukturelle Methoden (Ramanstreuung und Elektronenrückstreubeugung), elektrische und optoelektrische Methoden (Dunkel-, Photoleitfähigkeit und Halleffekt) sowie defektspektroskopische Methoden (photothermische Deflektionsspektroskopie, thermisch stimulierte Ströme und Elektronenspinresonanz). Der Schwerpunkt liegt dabei eher auf der Beschreibung experimenteller Details als auf der Erläuterung der zugrunde liegenden physikalischen Prinzipien.

2.1 Probenpräparation

Im Rahmen dieser Arbeit wurden poly-Si Schichten mittels Elektronenstrahldeposition und anschließender Festphasenkristallisation hergestellt. Als Trägermaterial für die Si-Filme wurden dabei folgende Substrate verwendet:

- Corning 1737F Glas
Corning Glas [40] ist ein nahezu alkalifreies Bor-Aluminiumsilikatglas, das vorwiegend bei der Herstellung von TFT-Displays zum Einsatz kommt. Das Glas wurde vor der Si-Deposition für 20 min in einer 1%igen Mucosol[®]-Lösung [41] bei 100 °C gereinigt.
- SiN_x / Schott Borofloat[®] 33 Glas
Das verwendete Siliziumnitrid-beschichtete Borofloat Glas wird von der Firma CSG Solar AG für die kommerzielle Produktion von Si-Dünnschichtsolarzellen eingesetzt. Ausgangsmaterial ist ein 3 mm dickes Borsilikatglas [42], auf das mittels plasmaunterstützter chemischer Gasphasendeposition („plasma enhanced chemical vapour

deposition“, PECVD) eine etwa 70 nm dicke amorphe Siliziumnitridschicht (a-SiN_x) abgeschieden wurde. Um den für die Festphasenkristallisation problematischen hohen Wasserstoffgehalt in der SiN-Schicht zu verringern wurden die Substrate zunächst für 4 Stunden bei 400 °C ausgeheizt. Anschließend erfolgte eine Reinigung in 10%iger 2-Propanollösung bei $T = 60$ °C für $t = 20$ min.

- SiO_x / c-Si

Als Referenzsubstrat diente zudem oxidiertes einkristallines Silizium. Hierfür wurde ein intrinsischer Floatzone (FZ) Si-Wafer ($d = 380$ μm , $\langle 100 \rangle$, $\rho > 3$ $\text{k}\Omega\text{cm}$) zunächst einer standard RCA-Reinigung unterzogen und anschließend bei $T = 1000$ °C für $t = 150$ min in einer $\text{O}_2\text{:HCL}$ -Atmosphäre thermisch oxidiert. Die Dicke des so hergestellten Oxids betrug $d_{\text{ox}} \approx 110$ nm. Eine weitere Reinigung vor der Si-Deposition erfolgte nicht.

Die Deposition des Si-Ausgangsmaterials auf die gereinigten Substrate erfolgte mittels Elektronenstrahlverdampfung von FZ Si-Tabletten (nominell undotiert, Reinheit 6N, $\rho > 1$ $\text{k}\Omega\text{cm}$) mit einer Rate von ≈ 40 Å/s bei einem Depositionsdruck von $p \approx 10^{-7}$ mbar. Für die in-situ Dotierung der Schichten wurde während der Deposition zusätzlich Bor aus einer Effusionszelle thermisch verdampft. Die gewählte Effusionszellentemperatur von $T_{\text{Eff}} = 1640$ °C entsprach dabei einer nominellen Dotierkonzentration in den Filmen von $N_A \approx 2 \cdot 10^{16}$ cm^{-3} . Um den Einfluss der Depositionstemperatur zu untersuchen wurde die Substrattemperatur zwischen $T_d = 50$ °C und $T_d = 500$ °C variiert. Dabei erfolgte die Beschichtung aller drei Substrate im selben Depositionsdurchgang. Die Schichtdicke der so abgeschiedenen Si-Filme lag zwischen $d \approx 1.1$ μm und $d \approx 1.3$ μm . Direkt nach der Deposition erfolgte die Festphasenkristallisation der Schichten in einem Rohrofen (Quarzrohr) für 24 Stunden bei $T = 600$ °C unter N_2 -Atmosphäre. Um eine Vergleichbarkeit der festphasenkristallisierten poly-Si Filme zu gewährleisten wurden dabei alle Proben im gleichen Durchgang kristallisiert. Abschließend wurde die Kristallinität der Schichten mittels Raman-Messungen überprüft.

An einzelnen poly-Si Schichten wurde zusätzlich eine Wasserstoffpassivierung durchgeführt. Hierzu wurden die entsprechenden Filme bei $T = 350$ °C atomarem Wasserstoff ausgesetzt, welcher mittels eines optisch von den Proben isolierten Wasserstoff-Mikrowellenplasmas erzeugt wurde (remote hydrogen passivation [43]). Zur besseren Identifikation des durch die Passivierung in die poly-Si Filme eingebrachten Wasserstoffs

wurde anstelle von Wasserstoff das chemisch identische Isotop Deuterium verwendet. Die Begriffe Deuterium und Wasserstoff bzw. Deuterium- und Wasserstoffpassivierung werden im Folgenden wechselseitig gebraucht. Um das Passivierungszeitverhalten zu untersuchen wurde die Passivierung jeweils nach einer Passivierungszeit t_H unterbrochen und im Anschluss an die Messung wieder fortgesetzt. Unmittelbar vor jeder Passivierung wurde das auf der Probenoberfläche vorhandene Siliziumoxid, das als Wasserstoffdiffusionsbarriere wirkt, mit einer 1%igen HF-Lösung entfernt.

2.2 Charakterisierungsmethoden

2.2.1 Ramanspektroskopie

Die Ramanspektroskopie ist ein Standardverfahren zur Untersuchung der Phononeneigenschaften von Festkörpern. Monochromatisches Licht trifft auf die zu untersuchende Probe und wechselwirkt dort inelastisch mit den Phononen des Kristalls. Im einfachsten Fall besteht diese Wechselwirkung genau aus der Erzeugung (Stokes) bzw. Vernichtung (Anti-Stokes) eines Phonons. Die Frequenzdifferenz zwischen eingestrahlttem Licht (ω_0) und gestreutem Licht (ω_S bzw. ω_{AS}) entspricht in diesem Fall der Energie des erzeugten/vernichteten Phonons ($\hbar\omega_P$):

$$\hbar\omega_P = \pm (\hbar\omega_0 - \hbar\omega_{S/AS}) \quad (2.1)$$

Zusätzlich können mittels Ramanmessungen auch lokale Gitterschwingungen untersucht werden, die u.a. Aufschluss über die Konzentration sowie die lokale Bindungskonfiguration von Wasserstoff im Kristallgitter geben. Alle Ramanmessungen wurden mit einem S & I TriVista Ramanspektrometer in Rückstreugeometrie bei Raumtemperatur durchgeführt. Die Anregung erfolgte mit einem Ar^+ -Ionenlaser bei einer Wellenlänge von $\lambda = 514.5 \text{ nm}$. Der im Aufbau verwendete 3-stufige Gittermonochromator hatte eine spektrale Auflösung von $\Delta\nu \approx 0.3 \text{ cm}^{-1}$. Für die Bestimmung von Raman-Tiefenprofilen wurden einzelne poly-Si Schichten zusätzlich schrittweise mit einer Siliziumätze bestehend aus 30 Volumenanteilen HNO_3 (65%ig), 15 Volumenanteilen H_2O , 10 Volumenanteilen H_3PO_4 (85%ig) und einem Volumenanteil HF (50%ig) abgeätzt. Die Dauer jedes Ätzschrittes betrug 15 s bei einer Ätzrate von etwa 67 Å/s .

2.2.2 Elektronenrückstreubeugung (EBSD)

Die Elektronenrückstreubeugung ist ein Verfahren zur Bestimmung der kristallographischen Information einer Probe. Der Elektronenstrahl eines Rasterelektronenmikroskops (REM) streift eine geeignet angeordnete kristalline bzw. polykristalline Probe. Hierbei werden die auf die Probe treffenden Elektronen an den Netzebenen des Kristalls unter dem Bragg-Winkel gebeugt und erzeugen so ein Beugungsmuster, welches charakteristisch für die Struktur und die Orientierung des Kristalls ist. Durch Abrastern der Probe und computerunterstützte Auswertung der mittels einer CCD-Kamera aufgenommenen Beugungsbilder erhält man Informationen über Korngrößen, Kristallorientierungen und Korngrenzenfehlanspassungen in polykristallinem Material. Die EBSD-Messungen wurden mit einem Hitachi REM S-4100 mit Feldemissionskathode und einem EDAX TSL EBSD-Analysesystem bei einer Beschleunigungsspannung von 25 kV durchgeführt.

2.2.3 Dunkel- und Photoleitfähigkeit

Für die Durchführung elektrischer Messungen wurden punktförmige Goldkontakte (Durchmesser ≈ 1 mm) mittels thermischer Verdampfung in den Ecken von $5 \cdot 5$ mm² großen Probenstücken abgeschieden. Ein eventuell vorhandenes Oxid auf der Probenoberfläche wurde dabei zuvor mit einer 1%igen HF-Lösung entfernt. Die IV-Kennlinien der auf diese Weise hergestellten Kontakte zeigten im gesamten Temperaturbereich von 50 K bis 330 K ein ideal ohmsches Verhalten. Leitfähigkeitsmessungen bei Raumtemperatur erfolgten in der Van der Pauw Konfiguration mit Mittelung über alle Kontaktpermutationen. Temperaturabhängige Leitfähigkeitsmessungen wurden mittels 4-Punkt Messungen an denselben Proben in einem anderen Messaufbau durchgeführt. Da mit diesem Messaufbau keine direkte Bestimmung des geometrischen Korrekturfaktors und somit des Absolutwertes der spezifischen Leitfähigkeit σ möglich war, wurden die so gemessenen $\sigma(T)$ -Kurven nachträglich auf den korrekten Leitfähigkeitswert bei Raumtemperatur skaliert. Für die Bestimmung der Photoleitfähigkeit wurden die Proben zusätzlich mit einer weißen LED beleuchtet. Hierbei wurde unter Beleuchtung die Leitfähigkeit σ_{light} mittels 4-Punkt Messung ermittelt und anschließend die Photoleitfähigkeit σ_{ph} durch Subtraktion der Dunkelleitfähigkeit σ_d gemäß $\sigma_{\text{ph}} = \sigma_{\text{light}} - \sigma_d$ bestimmt. Die Temperaturabhängigkeit sowohl der Dunkel- als auch der Photoleitfähigkeit wurde im Temperaturbereich von 50 K bis 300 K untersucht.

2.2.4 Halleffekt

Zur Bestimmung des Leitungstyps sowie der Konzentration und Beweglichkeit freier Majoritätsladungsträger wurden Halleffekt-Messungen in der Van der Pauw Konfiguration durchgeführt. Die Bestimmung der Ladungsträgerkonzentration n und der Hallbeweglichkeit μ_H erfolgte entsprechend der gewöhnlichen Beziehungen

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{eR_H} \\ \mu_H &= \sigma R_H \end{aligned} \tag{2.2}$$

aus dem Hallkoeffizienten R_H und der Leitfähigkeit σ . Um das Verhalten von n und μ_H unter optischer Anregung zu untersuchen wurden die poly-Si Filme während der Halleffektmessung zusätzlich mit dem weißen Licht einer Halogenlampe (Farbtemperatur ≈ 3000 K) bei unterschiedlicher Intensität beleuchtet.

2.2.5 Thermisch stimulierte Ströme (TSC)

Die Methode der thermisch stimulierten Ströme ist ein spektroskopisches Verfahren zur Untersuchung lokalisierter Zustände innerhalb der Bandlücke. Hierfür wird die Probe bei einer niedrigen Temperatur T_0 für eine Dauer t_{fill} mit Licht einer bestimmten Intensität beleuchtet. Ein Teil der bei der Beleuchtung erzeugten Überschussladungsträger wird dabei von lokalisierten Zuständen in der Bandlücke eingefangen und kann aufgrund der niedrigen thermischen Energie ($\approx kT$) nicht sofort wieder emittiert werden. Nach dem Ausschalten der Lichtquelle verbleibt die Probe für eine Relaxationszeit t_{relax} im Dunkeln. Während dieser Zeit nimmt die Leitfähigkeit σ aufgrund der Rekombination von Überschussladungsträgern zunächst schnell ab. Im Anschluss wird die Probe mit einer konstanten Heizrate $\beta = dT/dt$ von T_0 bis zu einer oberen Temperatur T erwärmt. Während dieser Temperaturrampe werden die eingefangenen Ladungsträger thermisch emittiert. Dies führt zu einer Zunahme der Leitfähigkeit, die bei anliegendem elektrischem Feld als zusätzlicher Strom gemessen werden kann. Nach Abzug der Dunkelleitfähigkeit σ_d bzw. des Dunkelstromes I_d ergibt sich die thermisch stimulierte Leitfähigkeit σ_{TSC} bzw. der thermisch stimulierte Strom I_{TSC} . Die TSC-Messungen wurden in 2-Punkt Geometrie mit einer Spannung von $U = 1$ V und einer Heizrate von $\beta = 100$ mK/s durchgeführt. Sowohl für die Beleuchtung als auch für die Relaxation des Photostroms wurde eine Zeit von $t_{\text{fill}} = t_{\text{relax}} = 10$ min verwendet.

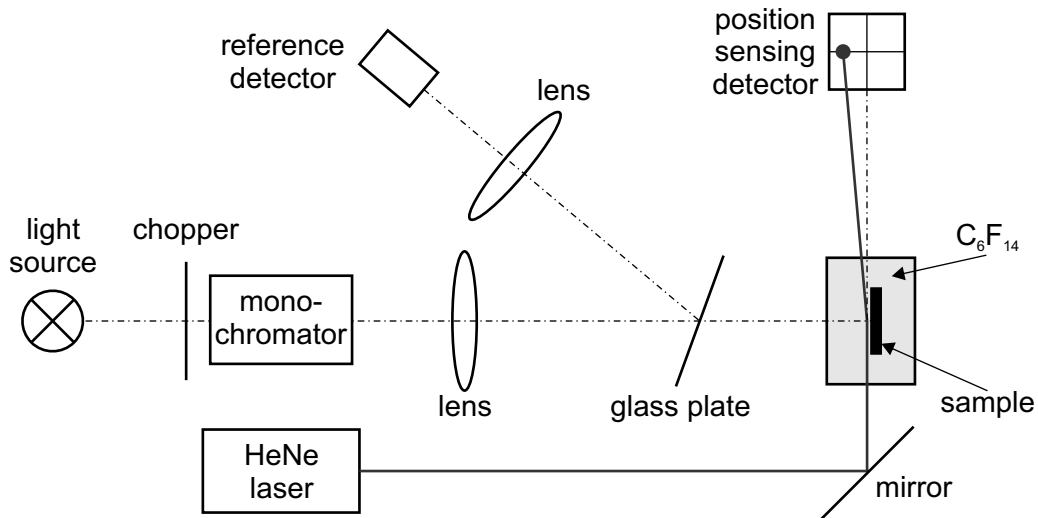


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Messaufbaus zur photothermischen Deflektionsspektroskopie (PDS).

2.2.6 Photothermische Deflektionsspektroskopie (PDS)

Die Untersuchung der optischen Absorption erfolgte mittels der Methode der photothermischen Deflektionsspektroskopie [44]. Der entsprechende experimentelle Aufbau ist in Abb. 2.1 dargestellt. Die zu untersuchende Probe befindet sich in einem mit Tetradeafluorohexane (C_6F_{14}) gefüllten Gefäß und wird mit monochromatischem Licht beleuchtet. Die Absorption des Lichts führt zu einer Erwärmung der Probe und somit zu einem Temperaturgradienten in der Flüssigkeit nahe der Probenoberfläche. Da der Brechungsindex von Tetradeafluorohexane stark temperaturabhängig ist, bedingt dieser Temperaturgradient einen großen Brechungsindexgradienten. Ein parallel zur Probenoberfläche geführter Laserstrahl wird folglich abhängig von der Erwärmung der Probe abgelenkt. Die Stärke der Ablenkung des Laserstrahls, die mittels eines Positionsempfindlichen Detektors gemessen wird, ist dabei in erster Näherung proportional zum Absorptionskoeffizienten α der Probe. Aufgrund ihrer hohen Empfindlichkeit ermöglicht die PDS im Gegensatz zu konventionellen Transmissions- und Reflektionsmessungen insbesondere auch die Bestimmung des Absorptionskoeffizienten für Photonenenergien unterhalb der Bandlücke. In diesem Energiebereich findet die Absorption über Zustände in der Bandlücke statt und man erhält somit Informationen über die Verteilung lokalisierter Zustände. PDS Messungen an amorphem Silizium (a-Si) zeigen z.B., dass der Absorptionskoeffizient unterhalb der Bandlückenenergie in diesem Material direkt mit

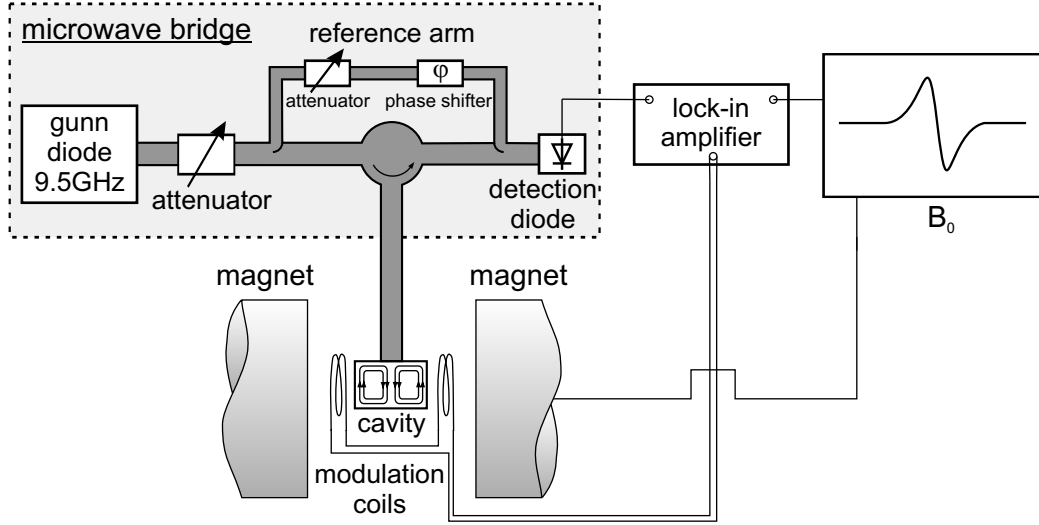


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung des Messaufbaus zur Elektronenspinresonanzspektroskopie (ESR-Spektroskopie).

der Dangling-Bond Konzentration korreliert [45]. PDS-Messungen an festphasenkristallisierten poly-Si Schichten wurden in einem Energiebereich von $3.0 \text{ eV} \geq E \geq 0.5 \text{ eV}$ mit einer Auflösung von $\Delta E = 0.01 \text{ eV}$ bei Raumtemperatur durchgeführt.

2.2.7 Elektronenspinresonanz (ESR)

Die Elektronenspinresonanz ist eine gängige Methode zur Charakterisierung und Quantifizierung paramagnetischer Zustände/Defekte u.a. in der Bandlücke von Halbleitern. Der Messaufbau sowie das zugrunde liegende Messprinzip sind in Abb. 2.2 veranschaulicht. Die zu untersuchende Probe befindet sich innerhalb eines Mikrowellenresonators in einem Mikrowellenfeld mit der Frequenz ν und einem statischen Magnetfeld B_0 . Während einer Messung wird B_0 in einem gewissen Bereich (0 T bis max. 0.6 T) durchgeföhren und die Änderung in der Absorption der Mikrowellenstrahlung gemessen. Für die genaue und empfindliche Detektion der Mikrowellenabsorption mittels Lockin-Technik wird das statische Feld B_0 zusätzlich mit einem Wechselfeld $\tilde{B}$ (Amplitude: 5 G, Frequenz: 100 kHz) moduliert.

Durch Wechselwirkung des Magnetfeldes B_0 mit den magnetischen Momenten der Elektronen (Spins) in der Probe wird gemäß dem Zeeman-Effekt [46] die zweifache Spin-Entartung der Elektronenenergieniveaus aufgehoben. Für die Aufspaltung ΔE

zwischen den beiden Zeeman-Niveaus gilt:

$$\Delta E = g\mu_B B_0 \quad (2.3)$$

Hierbei sind μ_B das Bohrsche Magneton und g der Lande-Faktor, der auch als g-Wert bezeichnet wird. Ist der energetische Abstand ΔE der beiden Zeeman-Niveaus gleich der Photonenenergie $h\nu$ der eingestrahlten Mikrowellenstrahlung, so wird diese absorbiert. Freie Elektronen besitzen einen festen g-Wert von $g = 2.0023$. In Festkörpern dagegen hängt der g-Wert stark von der lokalen Umgebung der Elektronen ab und ermöglicht so die Unterscheidung verschiedenartiger paramagnetischer Defekte. Die Intensität des Absorptionssignals ermöglicht ferner eine Quantifizierung des entsprechenden Defektes. Hierfür wird die ESR-Signalintensität der zu untersuchenden Probe mit der eines bekannten a-Si Spinstandards verglichen. ESR-Messungen wurden bei Raumtemperatur an poly-Si Filmen auf Corning Glas mit einem Bruker Eleksys 580 ESR-Spektrometer im X-Band ($\nu = 9.75$ GHz) bei einer Mikrowellenleistung von $P \approx 0.1$ mW durchgeführt.

3 Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse struktureller, optischer und elektrischer Untersuchungen an festphasenkristallisierten poly-Si Schichten vorgestellt. Der Schwerpunkt liegt dabei auf den elektrischen Eigenschaften des polykristallinen Materials. Aufgrund des Einflusses von Korngrenzen auf den Ladungstransport sind die elektrischen Eigenschaften polykristalliner Halbleiter häufig eng mit der Struktur des Materials verknüpft. Aus diesem Grund werden in Abschnitt 3.1 zunächst die strukturellen Eigenschaften der poly-Si Filme sowohl vor als auch nach der Kristallisation mittels Raman- und EBSD-Messungen untersucht. Hierbei zeigt sich, dass es während der Festphasenkristallisation zu einer Verspannung der Schichten kommt, als deren Ursprung die Grenzfläche zum Substrat identifiziert wird. In Abschnitt 3.2 liegt der Fokus auf den elektrischen Eigenschaften der poly-Si Schichten. Anhand temperaturabhängiger Leitfähigkeits- und Halleffektmessungen wird der Ladungstransport zunächst im thermodynamischen Gleichgewicht und anschließend unter optischer Anregung untersucht. Die Ergebnisse zeigen dabei insbesondere, dass der Ladungstransport in poly-Si Filmen auf Corning Glas und auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas durch unterschiedliche Transportprozesse bestimmt wird und zudem stark von der Depositionstemperatur des amorphen Ausgangsmaterials abhängt. Als Ursache für den starken Einfluss der Präparationsparameter auf die elektrischen Transporteigenschaften von festphasenkristallisiertem poly-Si kommen sowohl intrinsische Defekte wie z.B. ungesättigte Si-Bindungen (Dangling-Bonds) als auch Defekte aufgrund extrinsischer Verunreinigungen während der Probenpräparation in Betracht. Deshalb erfolgt in den Abschnitten 3.3 und 3.4 eine Charakterisierung von Defekten und ihrer Beeinflussung durch eine Wasserstoffnachbehandlung mittels verschiedener spektroskopischer Verfahren wie ESR, PDS und TSC. Hierbei wird festgestellt, dass die Defektpassivierung mit Wasserstoff zum Einen zu einer Zunahme der Defektkonzentration und zum Anderen zu einer deutlichen Verschiebung der Fermienergie führt.

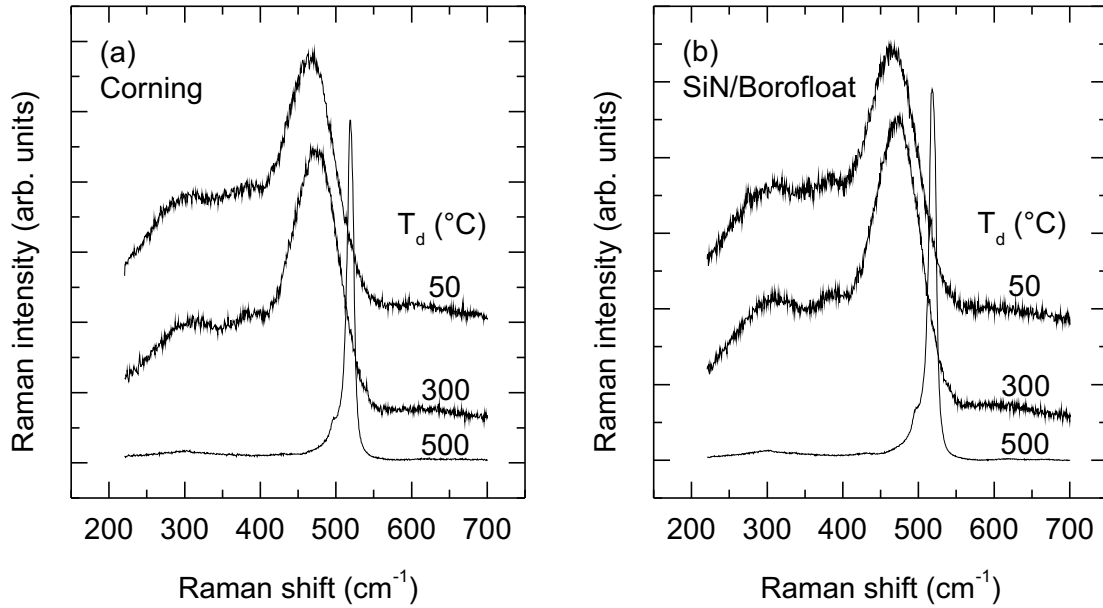


Abbildung 3.1: Ramanspektren von elektronenstrahldeponierten Si-Schichten auf (a) Corning Glas und (b) SiN-beschichtetem Borofloat Glas für verschiedene Depositionstemperaturen T_d . Die Spektren sind zur besseren Übersichtlichkeit entlang der Intensitätsachse verschoben.

3.1 Strukturelle Eigenschaften

3.1.1 Ramanstreuung

Die Untersuchung der strukturellen Eigenschaften von elektronenstrahldeponierten Si-Schichten sowohl vor als auch nach der Festphasenkristallisation erfolgte mittels Ramanmessungen bei Raumtemperatur. Die Anregungstiefe der verwendeten grünen Laserlinie ($\lambda = 514.5 \text{ nm}$) ist mit $1/\alpha \approx 1.3 \text{ }\mu\text{m}$ (siehe Kapitel 3.3.3) in etwa identisch mit der Schichtdicke der untersuchten Si-Filme. Abb. 3.1 zeigt Ramanspektren von elektronenstrahldeponierten Si-Filmen auf Corning Glas (a) bzw. SiN-beschichtetem Borofloat Glas (b) für Depositionstemperaturen von $T_d = 50 \text{ }^\circ\text{C}$, $300 \text{ }^\circ\text{C}$ und $500 \text{ }^\circ\text{C}$. Die bei Depositionstemperaturen $T_d \leq 300 \text{ }^\circ\text{C}$ abgeschiedenen Filme zeigen insgesamt drei breite Ramanlinien, eine ausgeprägte Linie bei $\nu \approx 475 \text{ cm}^{-1}$, sowie zwei kleinere Linien bei $\nu \approx 380 \text{ cm}^{-1}$ und $\nu \approx 280 \text{ cm}^{-1}$. Alle drei Ramanbanden sind charakteristisch für amorphes Silizium und können der Streuung an transversal-optischen (TO), longitudinal-optischen (LO) sowie longitudinal-akustischen (LA) Phononen zugeordnet werden [47]. Mit zunehmender Depositionstemperatur verschieben alle drei Linien

zu größeren Wellenzahlen und ihre Halbwertsbreite nimmt ab. Die Spektren der bei $T_d \geq 400\text{ °C}$ deponierten Schichten werden von einer schmalen Linie bei $\nu \approx 519\text{ cm}^{-1}$ dominiert, die der Streuung an LO- bzw. TO-Phononen im kristallinen Silizium (c-Si) entspricht. Die leichte Verschiebung dieser Phononenmode gegenüber der Linienposition in einkristallinem Silizium ($\nu = 520.3\text{ cm}^{-1}$) wird durch eine Verspannung der Schicht verursacht [48]. Die deutlich erkennbare Schulter bei $\nu \approx 500\text{ cm}^{-1}$ wird häufig für fein- [49] bzw. mikrokristallines [50] Si beobachtet und mit der Ramanstreuung in kleinen Kristalliten ($d < 5\text{ nm}$) [49, 51] oder gestörten kristallinen Bereichen [52, 53] gedeutet, in denen die Impulsauswahlregeln aufgrund von Defekten [54] oder der räumlichen Lokalisation der Phononen (phonon confinement effect [55]) gelockert sind. Zwischen den Ramanspektren der Schichten auf den beiden verschiedenen Substraten (Abb. 3.1 (a) und (b)) ist sowohl bezüglich der Linienpositionen als auch der Linienbreiten kein Unterschied zu erkennen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Schichten bis zu einer Depositionstemperatur von $T_d = 300\text{ °C}$ vollständig amorph und für $T_d \geq 400\text{ °C}$ polykristallin abgeschieden werden.

Nach der Festphasenkristallisation für 24 Stunden bei 600 °C zeigen die Ramanspektren aller Proben ausschließlich die Silizium LO/TO-Phononenlinie. Die genaue Linienposition und die Linienbreite variieren dabei stark mit der Depositionstemperatur des amorphen Ausgangsmaterials. Eine genaue Untersuchung dieser Abhängigkeit erfolgte mittels hochaufgelöster Ramanmessungen mit einer spektralen Auflösung von $\Delta\nu \approx 0.3\text{ cm}^{-1}$. Abb. 3.2 (a) und (b) zeigen die aus solchen Messungen mittels Anpassung mit einem Voigt-Profil bestimmte Linienposition und Linienbreite der LO/TO-Phononenmode als Funktion der Depositionstemperatur T_d . Als Referenz sind in beiden Abbildungen zusätzlich die für c-Si bestimmte Linienposition (520.3 cm^{-1}) und Linienbreite (3.0 cm^{-1}) als punktierte Linien dargestellt. Die Linienposition der festphasenkristallisierten poly-Si Schichten auf Corning Glas ist nahezu unabhängig von der Depositionstemperatur und gegenüber der Si-Referenz um 1.3 cm^{-1} bis 2.0 cm^{-1} zu kleineren Wellenzahlen hin verschoben. Für Schichten auf SiN/Borofloat Glas stimmt die Linienposition dagegen bis zu $T_d = 250\text{ °C}$ mit der von c-Si überein und verschiebt dann mit zunehmender Depositionstemperatur um zwei Wellenzahlen zu kleineren Frequenzen. Die Verschiebung der Ramanlinie zu kleineren Wellenzahlen weist dabei auf eine tensile Verspannung in den untersuchten Schichten hin [48]. Die Stärke der

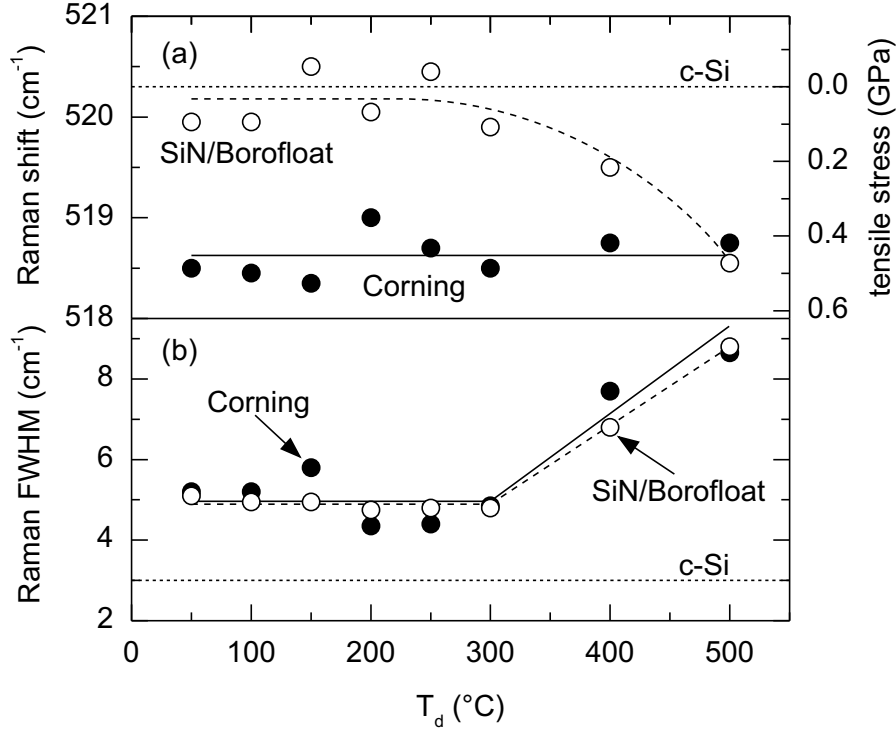


Abbildung 3.2: (a) Linienposition und (b) Halbwertsbreite der LO/TO-Ramanmode von festphasenkristallisiertem poly-Si auf Corning Glas und SiN-beschichtetem Borofloat Glas als Funktion der Depositionstemperatur T_d . Als Referenz sind die Linienposition und Breite von einkristallinem Silizium dargestellt (punktierter Linien).

Verspannung kann mit Hilfe der Beziehung [56]

$$\sigma_{st} \text{ (GPa)} = -0.27 \text{ GPa/cm}^{-1} \cdot [\nu_{LO/TO} \text{ (cm}^{-1}) - 520.3 \text{ cm}^{-1}] \quad (3.1)$$

über die Linienposition $\nu_{LO/TO}$ der LO/TO-Ramanmode abgeschätzt werden und beträgt bis zu $\sigma_{st} \approx 0.5$ GPa (siehe rechte Achse in Abb. 3.2 (a)). Bemerkenswert ist hier insbesondere die stark unterschiedliche Verspannung der festphasenkristallisierten Schichten auf Corning Glas bzw. SiN-beschichtetem Borofloat Glas. Die Linienbreite der LO/TO-Ramanmode zeigt dagegen keine Substratabhängigkeit und ist für beide Substrate bis zu $T_d = 300$ °C konstant bei $\Delta\nu \approx (5.0 \pm 0.8) \text{ cm}^{-1}$. Für direkt kristallin abgeschiedene Schichten ($T_d \geq 400$ °C) nimmt die Linienbreite dann aber bis auf $\Delta\nu \approx 9 \text{ cm}^{-1}$ bei $T_d = 500$ °C zu. Diese Zunahme ist konsistent mit der durch die geringere mittlere Korngröße bedingten größeren strukturellen Unordnung in den

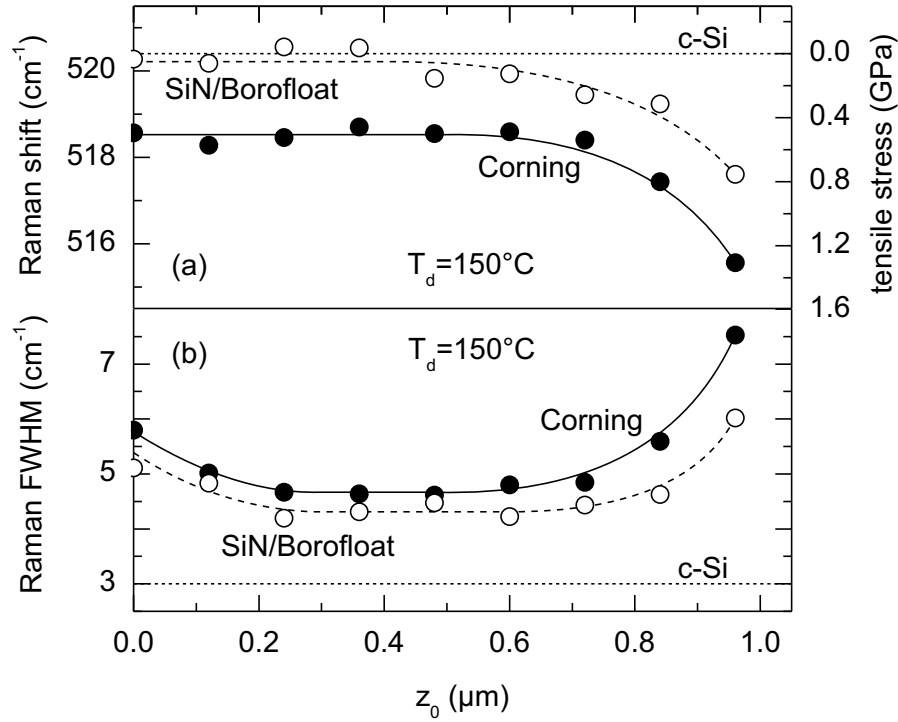


Abbildung 3.3: (a) Linienposition und (b) Halbwertsbreite der LO/TO-Ramanmode von festphasenkristallisiertem poly-Si auf Corning Glas und SiN-beschichtetem Borofloat Glas als Funktion der Tiefe z_0 von der Probenoberfläche. Als Referenz sind die Linienposition und Breite von einkristallinem Silizium dargestellt (punktierte Linien).

direkt kristallin abgeschiedenen Filmen [57]. Als mögliche Ursache für die Verspannung der Schichten insbesondere auf Corning Glas kommen sowohl Korngrenzen als auch die Grenzfläche zum Substrat in Betracht. Um dies genauer zu untersuchen wurden einzelne poly-Si Schichten mit einer Siliziumätze bestehend aus $\text{HNO}_3:\text{H}_3\text{PO}_4:\text{HF}:\text{H}_2\text{O}$ im Verhältnis 30:10:1:15 schrittweise abgedünnt und jeweils die LO/TO-Phononenmode gemessen. Abb. 3.3 zeigt die Linienposition und Linienbreite der LO/TO-Ramanmode als Funktion der Ätztiefe z_0 für die bei $T_d = 150^\circ\text{C}$ auf Corning Glas und SiN/Borofloat Glas deponierten poly-Si Schichten. Ausgehend von der Probenoberfläche bei $z_0 = 0 \mu\text{m}$ ändert sich die Linienposition bis zu einer Tiefe von $z_0 \approx 0.6 \mu\text{m}$ für beide Schichten zunächst nicht und verschiebt dann mit weiterer Annäherung an das Substrat deutlich um mehr als 2 cm^{-1} zu kleineren Frequenzen. Der Linienabstand zwischen den Filmen auf Corning Glas und SiN-beschichtetem Borofloat Glas bleibt dabei über die gesamte Tiefe konstant. Abb. 3.3 (b) zeigt die zugehörigen Halbwertsbreiten als Funktion von z_0 .

Die Linienbreite nimmt bis zu einer Tiefe von $z_0 \approx 0.2 \mu\text{m}$ zunächst leicht ab, ist dann bis zu $z_0 \approx 0.7 \mu\text{m}$ annähernd konstant und steigt für $z_0 > 0.7 \mu\text{m}$ schließlich wieder an. Die Zunahme ist für die Schicht auf SiN/Borofloat Glas dabei erkennbar geringer als für die Schicht auf Corning Glas, die zudem über die gesamte Schichtdicke eine größere absolute Halbwertsbreite zeigt.

Da die Eindringtiefe der anregenden Laserlinie vergleichbar mit der Schichtdicke und vor allem deutlich größer als eine einzelne Ätzstufe Δz_0 ist, müssen die Spektren für die korrekte Bestimmung eines Tiefenprofils entfaltet werden. Hierfür wird davon ausgegangen, dass das gemessene Ramanspektrum aus einer Überlagerung von Lorentzlinien mit tiefenabhängiger Linienposition $\nu_0(z)$ und Linienbreite $\Delta\nu(z)$ besteht. Zusätzlich wird über den Absorptionskoeffizienten α die Abschwächung sowohl der Anregungsintensität I_0 als auch der Ramanintensität berücksichtigt. Durch Integration über die Schichtdicke d erhält man dann für das resultierende Ramanspektrum

$$I(\nu, z_0) = \frac{I_0}{\pi} \cdot \int_{z_0}^d \exp(-2\alpha z) \frac{\frac{\Delta\nu(z)}{2}}{(\nu - \nu_0(z))^2 + \left(\frac{\Delta\nu(z)}{2}\right)^2} dz \quad (3.2)$$

Die Ergebnisse dieser Raman-Tiefenanalyse zeigen, dass der tensile Stress zur Schicht-Substrat-Grenzfläche hin zunimmt und diese Grenzfläche somit als Ursprung für die Verspannung in den poly-Si Filmen angesehen werden kann. Gleichzeitig deutet die Zunahme der Halbwertsbreite aber auch auf eine Änderung der kristallinen Struktur im Bereich der Grenzflächen zum Substrat bzw. zur Oberfläche hin. Mögliche Ursachen für die Verspannung an der Grenzfläche sind z.B. die unterschiedliche thermische Ausdehnung von Substrat und Silizium [58] oder Verunreinigungen im Übergangsbereich zwischen Schicht und Substrat [59, 60]. Die Tatsachen, dass poly-Si Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas insgesamt deutlich weniger verspannt sind und dass die tensile Verspannung in poly-Si Schichten auf Corning Glas mit zunehmender Schichtdicke anscheinend nicht vollständig abgebaut werden kann sind weitere interessante Ergebnisse dieser Untersuchung, die in Kapitel 4.1 genauer diskutiert werden.

3.1.2 Elektronenrückstreubeugung (EBSD)

Die Untersuchung der kristallographischen Eigenschaften festphasenkristallisierter poly-Si Schichten erfolgte mit einem Rasterelektronenmikroskop mittels der Methode der Elektronenrückstreubeugung. Dieses Verfahren erlaubt die Bestimmung der Korngrößen

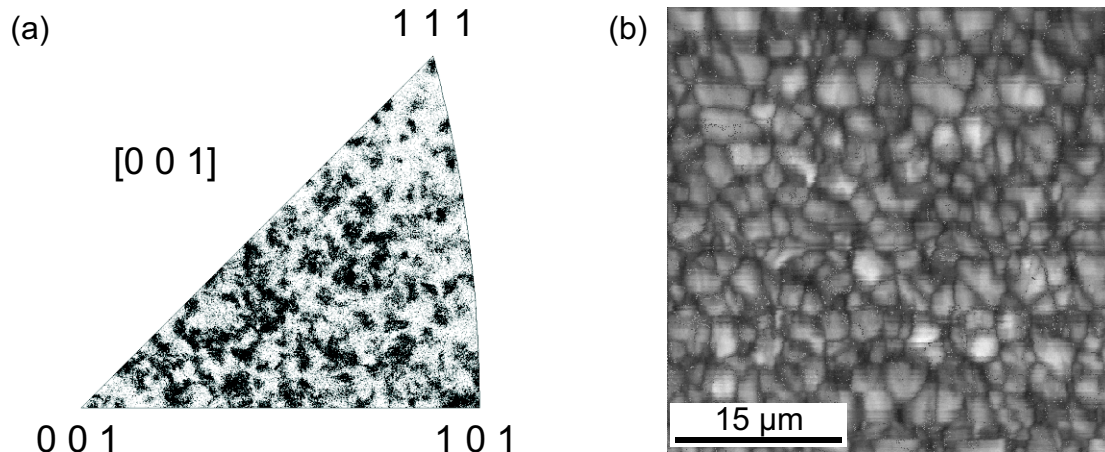


Abbildung 3.4: (a) Inverse Polfigur und (b) EBSD-Qualitätsbild von festphasenkristallisiertem poly-Si auf Corning Glas. Die amorphen Ausgangsschichten wurden bei $T_d = 300\ ^\circ\text{C}$ deponiert.

bzw. deren Verteilung, der Orientierung der Kristallite sowie der Fehlorientierungswinkel an den Korngrenzen. Abb. 3.4 (a) zeigt exemplarisch die inverse Polfigur einer festphasenkristallisierten poly-Si Schicht auf Corning Glas deponiert bei $T_d = 300\ ^\circ\text{C}$. Andere bei $T_d \leq 300\ ^\circ\text{C}$ sowohl auf Corning Glas als auch auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas abgeschiedene poly-Si Filme liefern identische Ergebnisse. An direkt kristallin abgeschiedenen Filmen ($T_d \geq 400\ ^\circ\text{C}$) sind aufgrund der zu geringen Korngrößen ($d < 100\ \text{nm}$) EBSD-Messungen dagegen nicht möglich. Anhand der inversen Polfigur ist eindeutig zu erkennen, dass die Kristallite der festphasenkristallisierten poly-Si Schichten keine Vorzugsorientierung aufweisen und somit eine zufällige Verteilung von Kristallorientierungen vorliegt. Eine solche Orientierungsverteilung ist typisch für festphasenkristallisiertes poly-Si und kann auf die spontane Nukleation in der Schicht zurückgeführt werden [61, 62]. In Abb. 3.4 (b) ist exemplarisch das zugehörige EBSD-Qualitätsbild dargestellt. Kristalline Areale, in denen die EBSD-Analyse eine hohe Güte hat, entsprechen in dieser Darstellung hellen Bereichen, während Gebiete mit einer geringen EBSD-Güte, d.h. geringer kristalliner Ordnung, dunkel erscheinen. Hierdurch sind sowohl einzelne Körner als auch Korngrenzen ohne vorheriges Anätzen der Korngrenzen deutlich erkennbar. Die beobachteten Strukturen sind für alle amorph abgeschiedenen poly-Si Schichten ($T_d \leq 300\ ^\circ\text{C}$) dabei nahezu identisch. Abb. 3.5 (a) zeigt eine typische Korngrößenverteilung nach der Festphasenkristallisation am Beispiel des bei $T_d = 300\ ^\circ\text{C}$ auf Corning Glas deponierten Films. Die Korngrößen sind normalverteilt (Linie in Abb. 3.5 (a)) und der Mittelwert liegt für alle amorph abgeschiedenen poly-Si

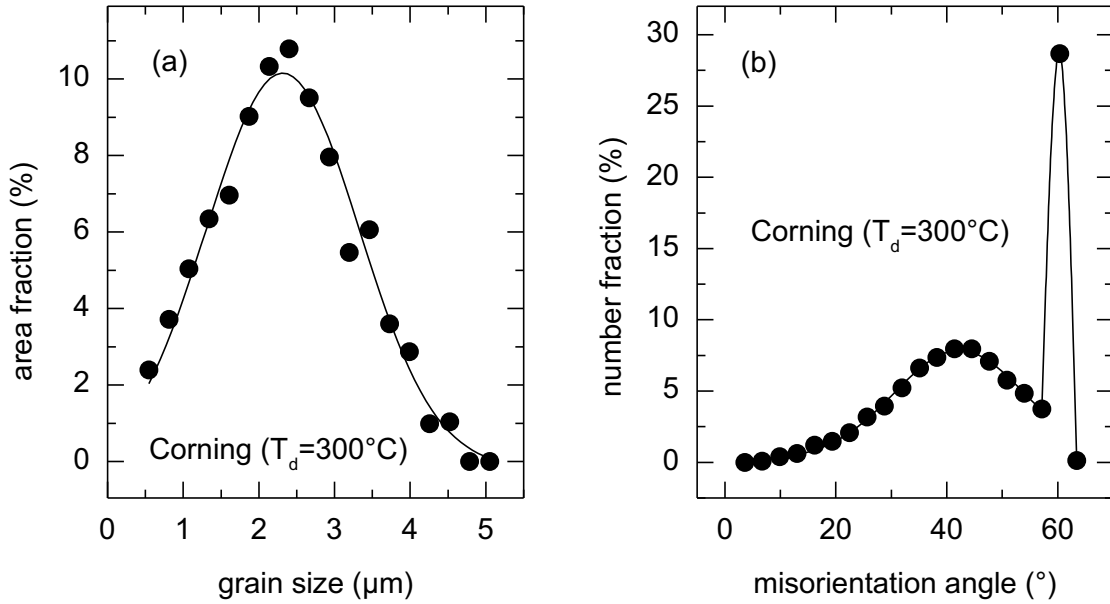


Abbildung 3.5: (a) Korngrößenverteilung und (b) Korngrenzenfehlorientierungsverteilung von festphasenkristallisiertem poly-Si auf Corning Glas. Die amorphen Ausgangsschichten wurden bei $T_d = 300\text{ °C}$ deponiert.

Filme im Bereich $1.9\text{ μm} \leq \bar{d} \leq 2.4\text{ μm}$. Für direkt kristallin abgeschiedene Schichten können die Korngrößen dagegen nur aus Rasterelektronenmikroskop-Aufnahmen zu $\bar{d} \leq 100\text{ nm}$ abgeschätzt werden. In Tabelle 3.1 sind die Ergebnisse der Korngrößenanalyse für alle Schichten unter der Annahme einer Gaußverteilung und als gewichteter Mittelwert zusammengefasst. Mit zunehmender Depositionstemperatur nehmen sowohl die mittlere Korngröße als auch im besonderen Maße die Breite der Verteilung ab. Die größere Abhängigkeit von der Depositionstemperatur zeigen dabei die auf SiN/Borofloat Glas deponierten Schichten. Bei diesen sinkt die mittlere Korngröße von $\bar{d} \approx 2.4\text{ μm}$ bei $T_d = 50\text{ °C}$ auf $\bar{d} \approx 1.9\text{ μm}$ bei $T_d = 300\text{ °C}$ und die Breite der Verteilung verringert sich um etwa die Hälfte. Die Bestimmung von Kristallorientierungen mittels EBSD erlaubt zusätzlich die Untersuchung der Fehlorientierung zwischen den Körnern an den Korngrenzen. In Abb. 3.5 (b) ist exemplarisch eine für die hier untersuchten Schichten typische Verteilung von Fehlorientierungswinkeln dargestellt. Die festphasenkristallisierten poly-Si Schichten zeigen eine breite Normalverteilung von Korngrenzenwinkeln mit einem Maximum um etwa 43° . Wie theoretische Berechnungen ergeben, ist eine solche Verteilung typisch für polykristalline kubische Materialien mit einer zufälligen Orientierung [63,64]. Zusätzlich ist noch ein großer Anteil (bis zu 30%) von Korngrenzen

Substrat	T_d (°C)	d_n (μm)	Δd_n (μm)	d_m (μm)	Δd_m (μm)
Corning Glas	50	2.4	3.2	2.21	0.97
	300	2.3	2.0	2.15	0.88
	500	(< 0.1)		(< 0.1)	
SiN/Borofloat Glas	50	2.4	3.1	2.12	0.91
	300	1.9	1.4	1.81	0.78
	500	(< 0.1)		(< 0.1)	

Tabelle 3.1: Aus EBDS-Messungen bestimmte mittlere Korngröße (d_n, d_m), Halbwertsbreite Δd_n und Standardabweichung Δd_m von festphasenkristallisiertem poly-Si gemäß einer Normalverteilung (Index „n“) bzw. als gewichteter Mittelwert (Index „m“). Die Korngrößen für die bei $T_d = 500^\circ\text{C}$ deponierten Proben (Werte in Klammern) sind Abschätzungen aus Rasterelektronenmikroskop-Aufnahmen an geätzten Proben.

mit einem Fehlorientierungswinkel von 60° zwischen benachbarten Körnern vorhanden, dem niederenergetische $\Sigma 3$ -Zwillingskorngrenzen zugeordnet werden können [65].

3.2 Elektrischer Transport

3.2.1 Dunkeltransport

Die elektrischen Eigenschaften der festphasenkristallisierten poly-Si Schichten hängen sowohl von der Substrattemperatur während der Elektronenstrahldeposition des amorphen Ausgangsmaterials als auch von der Art des verwendeten Substrats ab. Abb. 3.6 veranschaulicht den Einfluss dieser beiden Parameter auf die Dunkelleitfähigkeit σ_d bei $T = 300\text{ K}$ für poly-Si Filme auf Corning Glas (Corning), oxidiertem Wafer (SiO_x) sowie SiN-beschichtetem Borofloat Glas (SiN/Borofloat). Die Leitfähigkeit der poly-Si Schichten auf Corning Glas und auf SiO_x zeigt eine ausgeprägte Abhängigkeit von der Depositionstemperatur des Ausgangsmaterials, deren Verlauf durch ein umgekehrtes U mit einem Maximum von $\sigma_d \approx 4 \cdot 10^{-2} (\Omega\text{cm})^{-1}$ bei $T_d \approx 300^\circ\text{C}$ beschrieben werden kann. Die Filme auf oxidiertem Wafer zeigen ein nahezu identisches Verhalten, allerdings ist die maximale Leitfähigkeit mit $\sigma_d \approx 1 \cdot 10^{-1} (\Omega\text{cm})^{-1}$ etwas größer und σ_d fällt zu niedrigen Depositionstemperaturen geringer ab. Anzumerken ist ferner, dass die bei $T_d = 200^\circ\text{C}$ abgeschiedenen poly-Si Proben sowohl auf SiO_x als auch auf Corning Glas

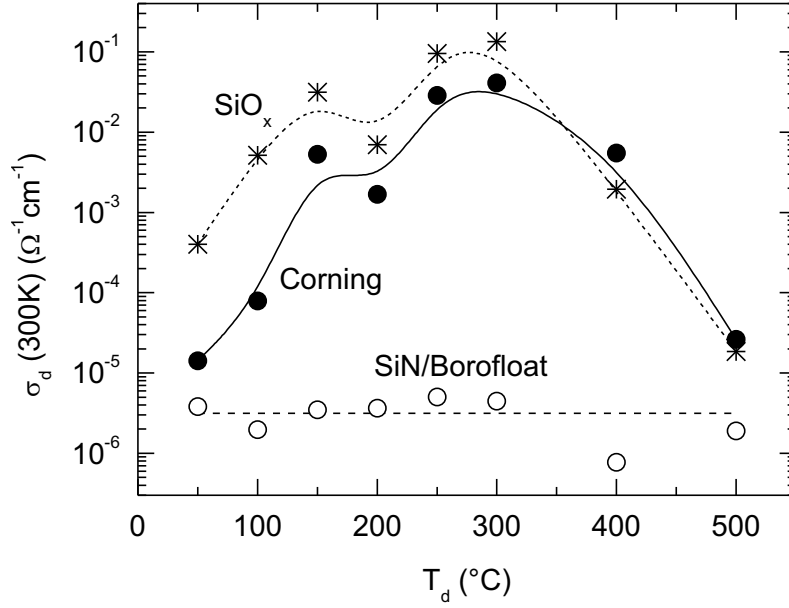


Abbildung 3.6: Dunkelleitfähigkeit σ_d von festphasenkristallisiertem poly-Si bei $T = 300$ K in Abhängigkeit von der Depositionstemperatur T_d für Schichten auf oxidiertem Wafer (SiO_x), Corning Glas (Corning) und SiN-beschichtetem Borofloat Glas (SiN/Borofloat).

eine vom Trend abweichende leicht verminderte Leitfähigkeit aufweisen. Das nahezu identische Verhalten der poly-Si Schichten auf Corning Glas und SiO_x im Bezug auf T_d zeigt, dass eine diffusionsbedingte Verunreinigung aus dem Corning-Substrat als Ursache für die unterschiedlichen elektrischen Eigenschaften der Schichten bei den hier verwendeten Prozesstemperaturen ($T_{\text{max}} \leq 600$ °C) weitestgehend ausgeschlossen werden kann. Auch die mögliche Diffusion von Sauerstoff während der Festphasenkristallisation wird für das hier verwendete Corning Glas nicht beobachtet [66]. Im deutlichen Gegensatz dazu zeigt die spezifische Leitfähigkeit der poly-Si Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas nahezu keine Abhängigkeit von der Depositionstemperatur und ist mit $8 \cdot 10^{-7} (\Omega \text{cm})^{-1} \leq \sigma_d \leq 5 \cdot 10^{-6} (\Omega \text{cm})^{-1}$ zudem um bis zu 4 Größenordnungen kleiner als auf den beiden anderen Substraten. Um zu untersuchen, ob die beobachtete große Variation in der Leitfähigkeit aus einer unterschiedlichen Konzentration freier Ladungsträger oder aus verschiedenen Ladungsträgerbeweglichkeiten resultiert, wurden Halleffekt-Messungen an den poly-Si Schichten durchgeführt. Alle poly-Si Filme zeigen dabei aufgrund der nominellen Bor-Dotierung eine eindeutige Löcherleitung. In Abb. 3.7 ist die Ladungsträgerkonzentration n bei $T = 300$ K in Abhängigkeit von

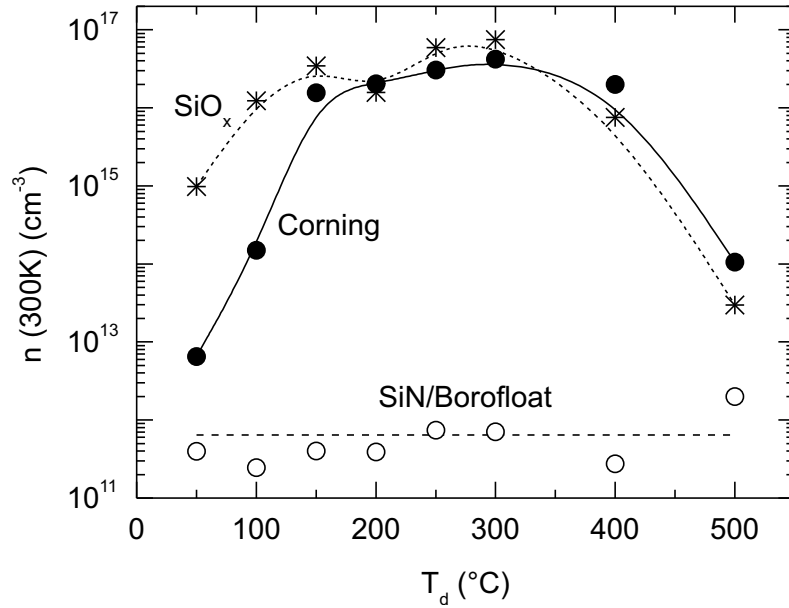


Abbildung 3.7: Ladungsträgerkonzentration n von festphasenkristallisiertem poly-Si bei $T = 300$ K in Abhängigkeit von der Depositionstemperatur T_d für Schichten auf oxidiertem Wafer (SiO_x), Corning Glas (Corning) und SiN-beschichtetem Borofloat Glas (SiN/Borofloat).

der Depositionstemperatur des amorphen Ausgangsmaterials für alle drei Substrate dargestellt. Analog zur Dunkelleitfähigkeit kann für poly-Si Schichten auf Corning Glas und SiO_x auch das Verhalten von n durch ein umgekehrtes U mit einem Maximum bei $T_d \approx 300$ °C beschrieben werden. Auf Corning Glas variiert die Ladungsträgerkonzentration dabei zwischen $n \approx 6 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ und $n \approx 4 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Für poly-Si Filme auf SiO_x ist die maximale Ladungsträgerkonzentration mit $7 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ bei $T_d = 300$ °C geringfügig höher und der Abfall zu niedrigen T_d etwa 2 Größenordnungen geringer als für Schichten auf Corning Glas. Insgesamt liegen die maximalen Ladungsträgerkonzentrationen leicht über der nominellen Dotierkonzentration von $N_A \approx 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Die Proben auf SiN/Borofloat Glas zeigen dagegen mit $3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3} \leq n \leq 2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ eine erstaunlich geringe Konzentration freier Ladungsträger. Diese ist mit Ausnahme des leichten Anstiegs zu $T_d = 500$ °C zudem nahezu unabhängig von der Depositionstemperatur. Einen weiteren interessanten Unterschied zwischen den verschiedenen Substraten zeigt die in Abb. 3.8 dargestellte Hallbeweglichkeit μ_H . Diese ist für poly-Si Schichten auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas um bis zu einen Faktor 10 größer als auf Corning Glas bzw. SiO_x und hängt zudem stark von der Depositionstemperatur

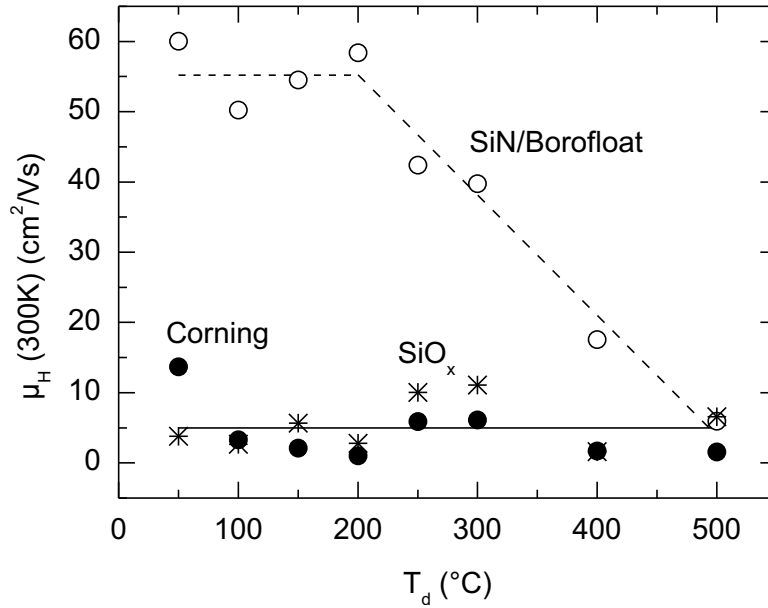


Abbildung 3.8: Hallbeweglichkeit μ_H von festphasenkristallisiertem poly-Si bei $T = 300\text{ K}$ in Abhängigkeit von der Depositionstemperatur T_d für Schichten auf oxidiertem Wafer (SiO_x), Corning Glas (Corning) und SiN-beschichtetem Borofloat Glas (SiN/Borofloat).

der amorphen Ausgangsschichten ab. Im Temperaturbereich $50\text{ }^\circ\text{C} \leq T_d \leq 200\text{ }^\circ\text{C}$ ist die Beweglichkeit konstant bei $\mu_H \approx 55\text{ cm}^2/\text{Vs}$ und fällt danach annähernd linear mit der Depositionstemperatur bis auf $\mu_H \approx 6\text{ cm}^2/\text{Vs}$ bei $T_d = 500\text{ }^\circ\text{C}$ ab. Die Hallbeweglichkeit der poly-Si Schichten auf oxidiertem Wafer und Corning Glas ist dagegen nahezu unabhängig von der Depositionstemperatur des amorphen Ausgangsmaterials und schwankt zwischen $\mu_H \approx 2\text{ cm}^2/\text{Vs}$ und $\mu_H \approx 14\text{ cm}^2/\text{Vs}$.

Anhand der Hall-Ergebnisse wird deutlich, dass der in Abb. 3.6 für die poly-Si Filme auf Corning Glas und auf SiO_x beobachtete Abfall der Leitfähigkeit zu niedrigen und zu hohen Depositionstemperaturen im Wesentlichen auf eine Abnahme der freien Ladungsträgerkonzentration innerhalb der Körner zurückzuführen ist, wohingegen die Hallbeweglichkeit annähernd konstant bleibt. Die geringe Leitfähigkeit der Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas ist ebenfalls auf eine sehr geringe Konzentration freier Ladungsträger zurückzuführen. Die im Vergleich zur nominellen Borkonzentration der Schichten von $[B] \approx 2 \cdot 10^{16}\text{ cm}^{-3}$ verminderte Ladungsträgerkonzentration kann dabei grundsätzlich drei Ursachen haben: a) Boratome befinden sich in den Filmen entweder in einer elektrisch nicht aktiven Konfiguration (z.B. an Korngrenzen oder

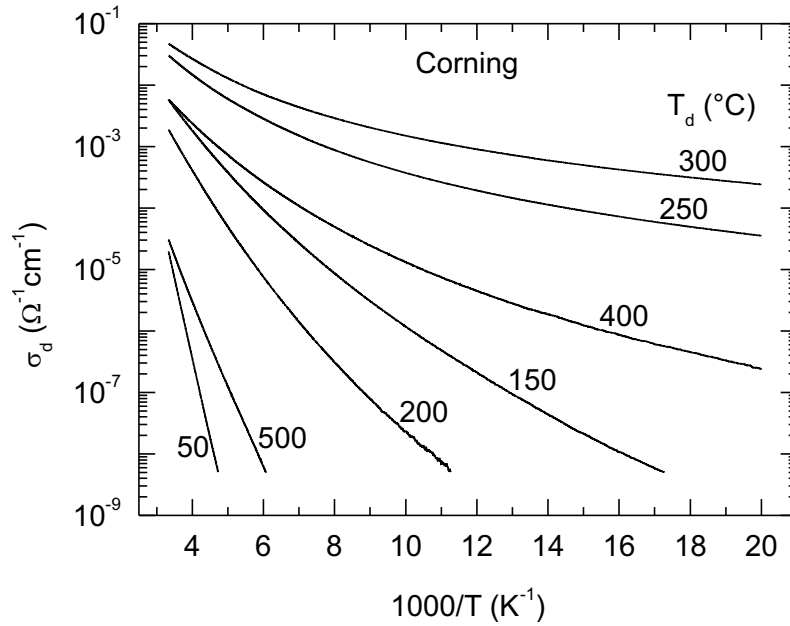


Abbildung 3.9: Dunkelleitfähigkeit σ_d von festphasenkristallisiertem poly-Si auf Corning Glas als Funktion der inversen Messtemperatur T^{-1} für unterschiedliche Depositionstemperaturen T_d .

gebunden in B-H Komplexen), b) es gibt zusätzlich kompensierende Donatoren oder c) die freien Ladungsträger elektrisch aktiver Boratome sind in tiefen Störstellen (z.B. an Korngrenzen) eingefangen. Letzteres ist dabei typisch für polykristalline Halbleiter und bedingt einen durch Potentialbarrieren an den Korngrenzen limitierten Ladungstransport.

Eine genauere Untersuchung der Transportmechanismen in festphasenkristallisierten poly-Si Schichten erfolgte mittels temperaturabhängiger Leitfähigkeits- und Halleffektmessungen. In Abb. 3.9 ist die spezifische Leitfähigkeit der poly-Si Filme auf Corning Glas als Funktion der reziproken Temperatur für unterschiedliche Depositionstemperaturen des amorphen Ausgangsmaterials dargestellt. Auffällig ist zunächst, dass mit Ausnahme der bei $T_d = 50$ $^{\circ}\text{C}$ deponierten Probe kein ausschließliches Arrhenius-Verhalten vorliegt und die Kurven insbesondere zu tiefen Temperaturen eine deutliche Krümmung aufweisen. Die Temperaturabhängigkeit von σ_d nimmt dabei bis zu $T_d = 300$ $^{\circ}\text{C}$ zunächst ab und dann mit weiter steigender Depositionstemperatur wieder zu. In Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Leitfähigkeitsuntersuchungen bei Raumtemperatur weicht auch das Temperaturverhalten der bei $T_d = 200$ $^{\circ}\text{C}$ deponierten poly-Si Schicht von diesem Trend ab. Die Abweichung von einem reinen Arrhenius-

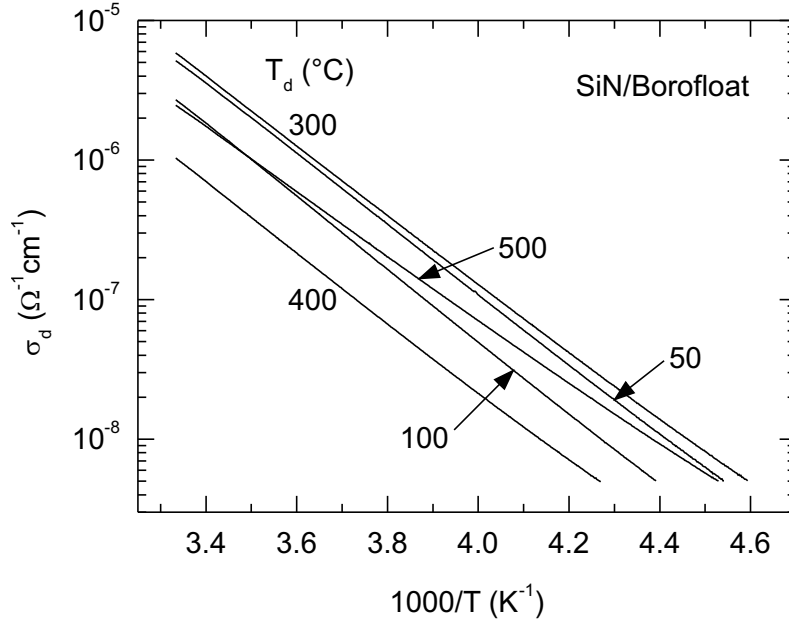


Abbildung 3.10: Dunkelleitfähigkeit σ_d von festphasenkristallisiertem poly-Si auf SiN/Borofloat Glas als Funktion der inversen Messtemperatur T^{-1} für unterschiedliche Depositionstemperaturen T_d .

Verhalten insbesondere zu tiefen Temperaturen wird häufig für polykristalline Halbleiter beobachtet [39,67] und in der Literatur unterschiedlichen physikalischen Prozessen zugeschrieben, die ausführlich in Kapitel 4.2.3 diskutiert werden. Im deutlichen Gegensatz zu den Schichten auf Corning Glas zeigen die in Abb. 3.10 dargestellten poly-Si Filme auf SiN/Borofloat Glas unabhängig von der Depositionstemperatur des amorphen Ausgangsmaterials ein nahezu vollständig aktiviertes Verhalten der Leitfähigkeit mit nur einer sehr geringen Krümmung der Kurven zu tiefen Temperaturen. Insgesamt lässt sich $\sigma_d(T)$ bei höheren Temperaturen für alle untersuchten Proben durch einen thermisch aktivierten Transport gemäß

$$\sigma(T) = \sigma_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A^\sigma}{kT}\right) \quad (3.3)$$

beschreiben. Hierbei sind E_A^σ die Aktivierungsenergie und σ_0 der exponentielle Vorfaktor der Leitfähigkeit. Die durch Anpassung an den linearen Teil der Kurven in Abb. 3.9 und Abb. 3.10 bestimmten Werte von E_A^σ und σ_0 sind als Funktion von T_d in Abb. 3.11 dargestellt. Auf Corning Glas zeigen sowohl E_A^σ als auch σ_0 eine ausgeprägte Abhängigkeit von der Depositionstemperatur. Die Aktivierungsenergie nimmt dabei

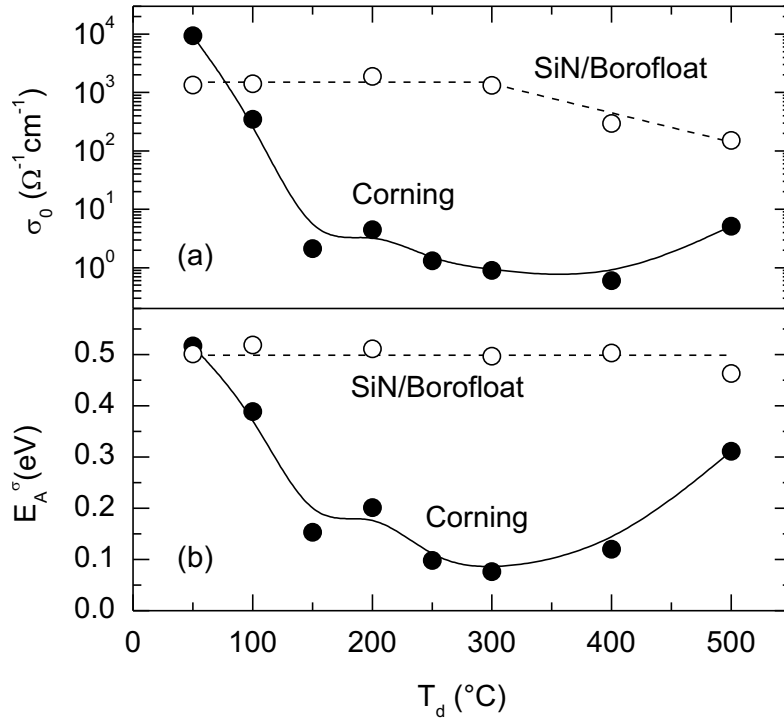


Abbildung 3.11: (a) Aktivierungsenergie E_A^σ und (b) exponentieller Vorfaktor σ_0 der Dunkelleitfähigkeit in Abhängigkeit von der Depositionstemperatur T_d für festphasenkristallisiertes poly-Si auf Corning Glas und SiN-beschichtetem Borofloat Glas.

mit steigender Depositionstemperatur zunächst von $E_A^\sigma \approx 0.52$ eV bei $T_d = 50$ °C bis auf $E_A^\sigma \approx 0.08$ eV bei $T_d = 300$ °C ab und steigt dann bis zu $T_d = 500$ °C wieder auf $E_A^\sigma \approx 0.31$ eV an. Ein ähnliches Verhalten zeigt auch der Vorfaktor der Leitfähigkeit, der im gesamten Temperaturbereich um mehr als 4 Größenordnungen zwischen $\sigma_0 \approx 1 \cdot 10^4$ (Ωcm) $^{-1}$ und $\sigma_0 \approx 6 \cdot 10^{-1}$ (Ωcm) $^{-1}$ variiert. Eine besonders starker Abfall von σ_0 ist dabei zwischen $T_d = 50$ °C und $T_d = 150$ °C zu beobachten. Auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas ist die Aktivierungsenergie mit $E_A^\sigma \approx 0.5$ eV dagegen unabhängig von der Depositionstemperatur und auch σ_0 hat bis zu $T_d = 300$ °C einen konstanten Wert von $\sigma_0 \approx 1 \cdot 10^3$ (Ωcm) $^{-1}$ und nimmt erst zu höheren Depositionstemperaturen um etwa eine Größenordnung ab.

Eine genauere Betrachtung zeigt, dass zwischen der Aktivierungsenergie und dem Vorfaktor der Leitfähigkeit ein funktionaler Zusammenhang der Form

$$\sigma_0(E_A^\sigma) = \sigma_{00} \cdot \exp\left(\frac{E_A^\sigma}{kT_{\text{iso}}}\right) \quad (3.4)$$

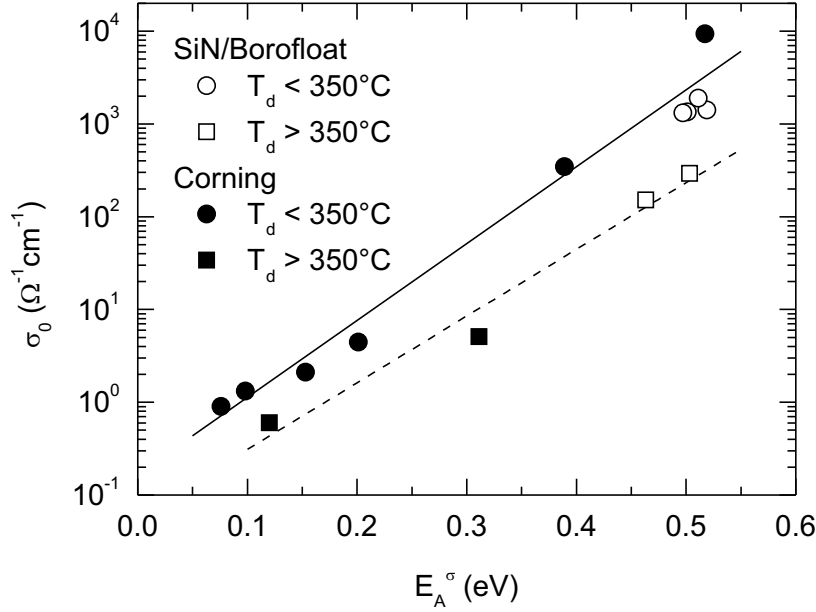


Abbildung 3.12: Funktionaler Zusammenhang zwischen dem exponentiellen Vorfaktor der Leitfähigkeit σ_0 und der Aktivierungsenergie E_A^σ (Meyer-Neldel-Verhalten) für festphasenkristallisierte poly-Si Schichten auf Corning Glas (volle Symbole) und SiN-beschichtetem Borofloat Glas (offene Symbole) für $T_d < 350^\circ\text{C}$ (Kreise) bzw. $T_d > 350^\circ\text{C}$ (Quadrate).

besteht. Hierbei sind σ_{00} und T_{iso} Konstanten. Abb. 3.12 veranschaulicht diese als Meyer-Neldel-Regel (MNR) [68] bekannte empirische Relation zwischen σ_0 und E_A^σ für festphasenkristallisierte poly-Si Schichten sowohl auf Corning Glas (ausgefüllte Symbole) als auch auf SiN/Borofloat Glas (offene Symbole). Hierbei fällt auf, dass Schichten, die bei der Elektronenstrahldeposition vollständig amorph abgeschieden wurden ($T_d \leq 300^\circ\text{C}$, Kreise) und Schichten, die bereits direkt kristallin deponiert wurden ($T_d \geq 400^\circ\text{C}$, Quadrate) durch unterschiedliche Meyer-Neldel-Parameter beschrieben werden. Die beste Anpassung nach Gleichung 3.4 (Linien in Abb. 3.12) erhält man für amorph abgeschiedene poly-Si Schichten mit $kT_{\text{iso}} \approx 53 \text{ meV}$ und $\sigma_{00} \approx 1.67 \cdot 10^{-1} (\Omega\text{cm})^{-1}$ bzw. für direkt kristallin abgeschiedene Proben mit $kT_{\text{iso}} \approx 60 \text{ meV}$ und $\sigma_{00} \approx 5.95 \cdot 10^{-2} (\Omega\text{cm})^{-1}$. Sehr ähnliche Meyer-Neldel-Parameter von $43 \text{ meV} \leq kT_{\text{iso}} \leq 67 \text{ meV}$ und $\sigma_{00} \approx 0.1 (\Omega\text{cm})^{-1}$ werden auch für den aktivierten Transport in amorphem Silizium beobachtet [69, 70]. Als mikroskopische Ursache für die auch in vielen anderen thermisch aktivierten Prozessen beobachtete Meyer-Neldel-Korrelation werden in der Literatur verschiedene Modelle vorgeschlagen. Diese basieren im Wesentlichen entweder auf der Annahme einer temperaturabhängigen Verschiebung

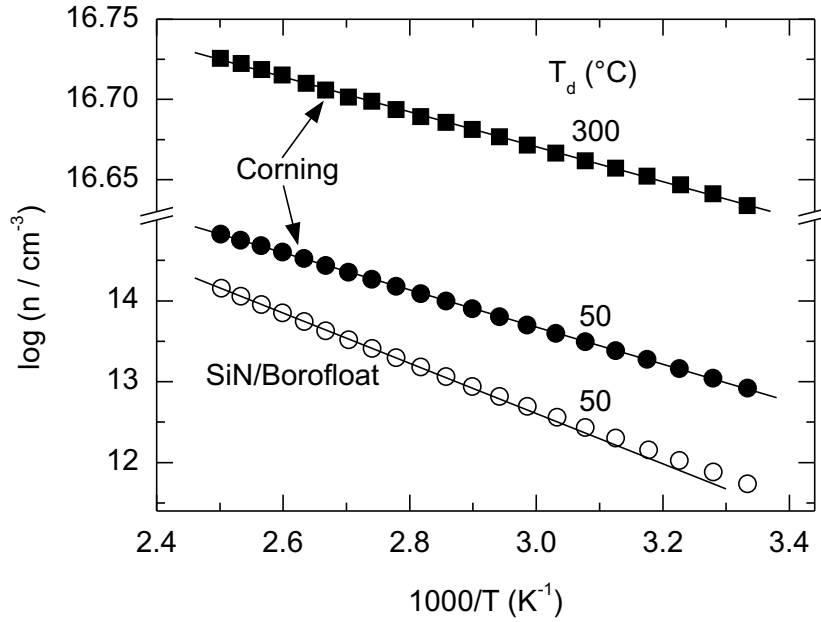


Abbildung 3.13: Ladungsträgerkonzentration n als Funktion der inversen Messtemperatur T^{-1} der bei $T_d = 50\text{ °C}$ und $T_d = 300\text{ °C}$ auf Corning Glas sowie der bei $T_d = 50\text{ °C}$ auf SiN/Borofloat Glas abgeschiedenen poly-Si Schichten. Die Linien sind Anpassungen gemäß Gleichung 3.5.

des Fermi- bzw. Transportenergieniveaus (Zustandsdichtemodell) [69, 71] oder auf der Annahme einer Vielphononenanregung über die Energiebarriere (thermodynamisches Modell) [72, 73]. Unabhängig vom zugrunde liegenden Modell bedeutet das Auftreten der Meyer-Neldel-Beziehung aber, dass die hier als Aktivierungsenergie bezeichnete Größe E_A^{σ} nicht direkt dem energetischen Abstand $\Delta E(T) = E_T(T) - E_F(T)$ zwischen dem Fermi-niveau E_F und der Transportenergie E_T zugeordnet werden kann und dass der exponentielle Vorfaktor σ_0 keine mikroskopisch definierte Leitfähigkeit darstellt. Eine weiterführende Diskussion der Meyer-Neldel-Beziehung und der zu ihrer Erklärung postulierten mikroskopischen Modelle findet in Kapitel 4.2.4 statt.

Um die mikroskopischen Transportprozesse detaillierter zu analysieren wurde die Temperaturabhängigkeit der Transportgrößen n und μ_H mittels temperaturabhängiger Halleffektmessungen untersucht. Abb. 3.13 zeigt die Ladungsträgerkonzentration n als Funktion der inversen Temperatur T^{-1} für die bei $T_d = 50\text{ °C}$ und $T_d = 300\text{ °C}$ auf Corning Glas sowie für die bei $T_d = 50\text{ °C}$ auf SiN/Borofloat Glas abgeschiedenen poly-Si Schichten. Die Ladungsträgerkonzentration aller poly-Si Filme auf Corning Glas kann im Temperaturbereich $300\text{ K} \leq T \leq 400\text{ K}$ eindeutig durch ein thermisch

Substrat	T_d (°C)	n_0 (cm ⁻³)	E_A^n (eV)	μ_0 (cm ² /Vs)	E_A^μ (eV)	E_A^σ (eV)
Corning	50	$3.64 \cdot 10^{20}$	0.455	76	0.044	0.499
	300	$9.94 \cdot 10^{16}$	0.022	69	0.062	0.084
SiN/Borofloat	50	$8.30 \cdot 10^{21}$	0.616	-	-	0.532
	300	$3.45 \cdot 10^{22}$	0.637	-	-	0.530
	500	$4.41 \cdot 10^{20}$	0.497	-	-	0.503

Tabelle 3.2: Aus temperaturabhängigen Hallmessungen nach Gleichung 3.5 und 3.6 bestimmte exponentielle Vorfaktoren (n_0 , μ_0) und Aktivierungsenergien (E_A^n , E_A^μ), sowie Aktivierungsenergie der spezifischen Leitfähigkeit E_A^σ .

aktiviertes Verhalten gemäß

$$n(T) = n_0 \exp\left(-\frac{E_A^n}{kT}\right) \quad (3.5)$$

beschrieben werden. Hierbei sind n_0 der exponentielle Vorfaktor und E_A^n die Aktivierungsenergie der Ladungsträgerdichte. Für poly-Si Schichten auf SiN/Borofloat Glas wird ein solches aktiviertes Verhalten dagegen nur für $T \geq 350$ K beobachtet, wohingegen die Kurven für $T < 350$ K eine deutliche Krümmung aufweisen. Das Abflachen der Kurven zu tiefen Temperaturen lässt sich dabei mit denselben Prozessen erklären, die auch für das Abflachen der Leitfähigkeitskurven in Frage kommen und die in Kapitel 4.2.3 diskutiert werden. Die aus der Anpassung der Daten nach Gleichung 3.5 (Linien in Abb. 3.13) ermittelten Werte der exponentiellen Vorfaktoren n_0 sowie der Aktivierungsenergien E_A^n sind in Tabelle 3.2 zusammengefasst. Für poly-Si Schichten auf Corning Glas zeigt E_A^n eine ausgeprägte Abhängigkeit von T_d mit einer minimalen Barrierenhöhe von $E_A^n \approx 22$ meV für $T_d = 300$ °C und einer maximalen Barrierenhöhe von $E_A^n \approx 455$ meV für $T_d = 50$ °C. Die Aktivierungsenergie E_A^n von amorph abgeschiedenen und festphasenkristallisierten poly-Si Filmen auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas hängt dagegen nur geringfügig von T_d ab und ist mit $E_A^n > 600$ meV zudem deutlich größer. Direkt kristallin deponierte poly-Si Schichten ($T_d \geq 400$ °C) auf SiN/Borofloat Glas haben eine geringere Aktivierungsenergie von $E_A^n \approx 500$ meV. Ein Vergleich der Werte von E_A^n und n_0 für verschiedene Proben zeigt weiterhin, dass auch diese Größen einer Meyer-Neldel-Beziehung folgen. Insgesamt deutet das Aktivierungsverhalten der Ladungsträgerkonzentration auf eine stark unterschiedliche Lage

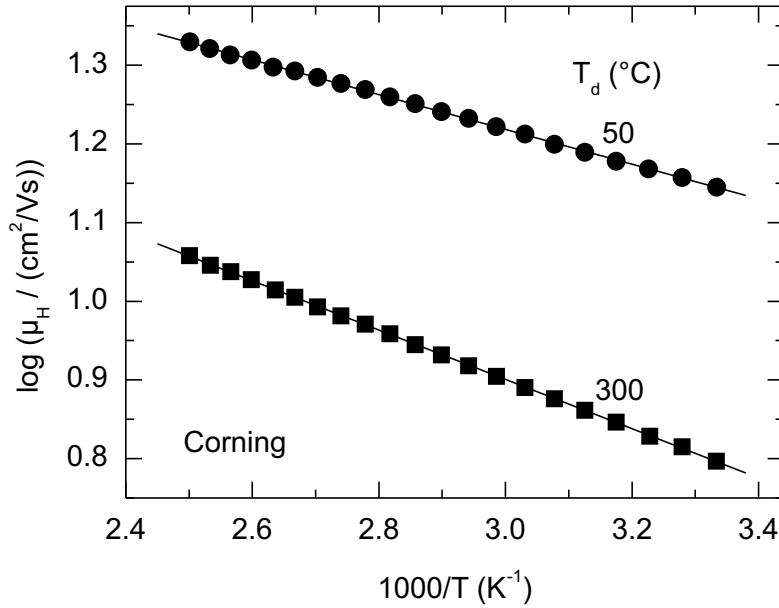


Abbildung 3.14: Hallbeweglichkeit μ_H von festphasenkristallisiertem poly-Si abgeschieden bei $T_d = 50\text{ °C}$ und $T_d = 300\text{ °C}$ auf Corning Glas als Funktion der inversen Messtemperatur T^{-1} .

des Fermi-niveaus in den nominell gleich dotierten Schichten hin. Mögliche Ursachen hierfür sind entweder kompensierende Donatoren, elektrisch inaktive Akzeptorkomplexe oder andere in der Bandlücke liegende Defekte z.B. an Korngrenzen. In Abb. 3.14 ist der Logarithmus der zugehörigen Hallbeweglichkeit μ_H für poly-Si Schichten auf Corning Glas als Funktion der inversen Temperatur dargestellt. Neben der Ladungsträgerkonzentration zeigt auch die Ladungsträgerbeweglichkeit in diesen Schichten über den gesamten Temperaturbereich ein thermisch aktiviertes Verhalten, das analog zu Gleichung 3.5 durch

$$\mu_H(T) = \mu_0 \exp\left(-\frac{E_A^\mu}{kT}\right) \quad (3.6)$$

mit dem exponentiellen Vorfaktor μ_0 und der Aktivierungsenergie E_A^μ der Ladungsträgerbeweglichkeit beschrieben werden kann. Die aus einer Anpassung nach Gleichung 3.6 (Linien in Abb. 3.14) ermittelten Werte dieser beiden Größen sind ebenfalls in Tabelle 3.2 angegeben. Die Aktivierungsenergie E_A^μ von poly-Si Schichten auf Corning Glas ist schwach von der Depositionstemperatur abhängig und nimmt von $E_A^\mu \approx 44\text{ meV}$ für $T_d = 50\text{ °C}$ auf $E_A^\mu \approx 62\text{ meV}$ für $T_d = 300\text{ °C}$ zu. Ein Vergleich der in Tabelle 3.2 zusammengefassten Aktivierungsenergien von n , μ und σ zeigt ferner, dass für Schichten

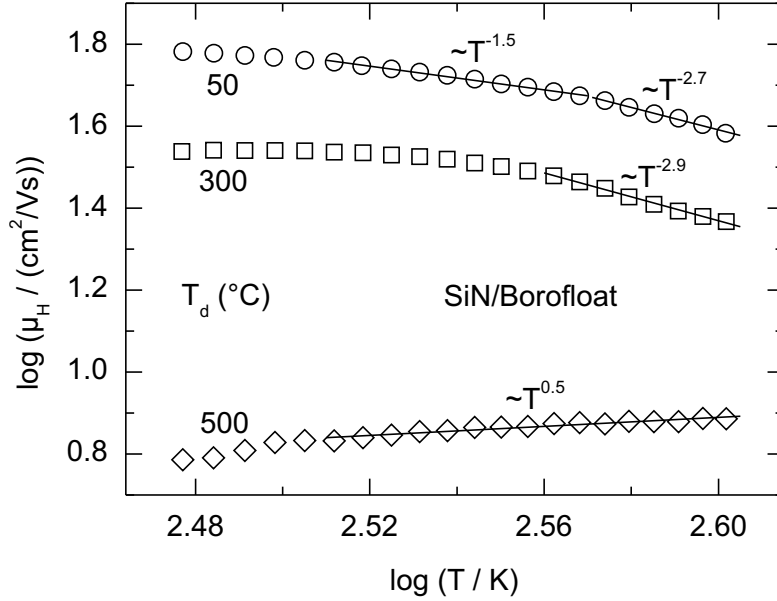


Abbildung 3.15: Hallbeweglichkeit μ_H von festphasenkristallisiertem poly-Si auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas als Funktion der Messtemperatur T für $T_d = 50\text{ °C}$, $T_d = 300\text{ °C}$ und $T_d = 500\text{ °C}$.

auf Corning Glas zwischen diesen Größen der Zusammenhang $E_A^\sigma \approx E_A^n + E_A^\mu$ besteht. Das thermisch aktivierte Verhalten von μ_H ist konsistent mit einem für polykristallines Material typischen barrierenlimitierten Ladungstransport. Ein völlig anderes Temperaturverhalten der Beweglichkeit wird dagegen für poly-Si Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas beobachtet. Abb. 3.15 zeigt $\log(\mu_H)$ als Funktion von $\log(T)$ für festphasenkristallisiertes poly-Si auf SiN/Borofloat Glas, abgeschieden bei $T_d = 50\text{ °C}$, 300 °C und 500 °C . Im deutlichen Gegensatz zu den Proben auf Corning Glas liegt hier kein aktiviertes Verhalten der Beweglichkeit vor. Vielmehr nimmt μ_H für die bei $T_d = 50\text{ °C}$ und $T_d = 300\text{ °C}$ deponierten Proben mit zunehmender Temperatur ab. Das Temperaturverhalten von μ_H zu höheren Temperaturen kann dabei annähernd durch

$$\mu_H(T) \propto T^\alpha \quad (3.7)$$

mit $\alpha \approx -1.5$ bzw. $\alpha \approx -2.7$ für die bei $T_d = 50\text{ °C}$ und mit $\alpha \approx -2.9$ für die bei $T_d = 300\text{ °C}$ abgeschiedene poly-Si Schicht beschrieben werden (Linien in Abb. 3.15). Die Beweglichkeit der bei $T_d = 500\text{ °C}$ deponierten Schicht nimmt dagegen mit steigender Temperatur leicht zu, kann aber ebenfalls gut durch Gleichung 3.7 mit $\alpha \approx 0.5$ angenähert werden (Linie in Abb. 3.15). Ein solches Temperaturverhalten der Bewe-

lichkeit ist nicht konsistent mit einem Transport über Korngrenzenbarrieren und deutet eher auf typische Streumechanismen in einkristallinem Silizium wie z.B. die Streuung an akustischen Phononen ($\alpha = -1.5$) oder an ionisierten ($\alpha = 1.5$) bzw. neutralen ($\alpha \approx 0$) Störstellen hin [74]. Aufgrund der Nichtparabolizität der Valenzbänder [75] werden für die Phononenstreuung in p-dotiertem c-Si experimentell aber auch deutlich vom diesem theoretischen Wert abweichende Exponenten von $-2.3 \leq \alpha \leq -2.9$ [76–78] beobachtet, die gut mit den hier bestimmten Werten übereinstimmen. Die Tatsache, dass auch der Exponent α eine Temperaturabhängigkeit zeigt, ist dabei konsistent mit der Überlagerung mehrerer Streumechanismen mit unterschiedlichem Temperaturverhalten [79]. Die Ergebnisse zeigen, dass in poly-Si Schichten auf SiN/Borofloat Glas und Corning Glas unterschiedliche Streumechanismen dominieren. Während poly-Si Filme auf Corning Glas ein für polykristallines Material typisches aktiviertes Verhalten von μ_H zeigen, lässt sich das Verhalten der Beweglichkeit für poly-Si Schichten auf SiN/Borofloat Glas eher durch Streumechanismen in einkristallinen Materialien beschreiben. Zusammen mit den deutlich verschiedenen absoluten Beweglichkeiten deutet dies auf einen unterschiedlich großen Einfluss der Korngrenzen in den poly-Si Filmen auf den beiden Substraten hin. Eine ausführliche Diskussion der möglichen Streumechanismen und des unterschiedlichen Einflusses der Korngrenzen auf den Ladungstransport in festphasenkristallisiertem poly-Si findet in Kapitel 4.2.1 statt.

3.2.2 Phototransport

Weitergehende Erkenntnisse über den Ladungstransport und zusätzliche Informationen über die Ladungsträgerrekombination über Defektzustände in festphasenkristallisiertem poly-Si erhält man aus der Untersuchung der Phototransporteigenschaften. Aus diesem Grund wurden sowohl Leitfähigkeits- als auch Halleffektmessungen unter Beleuchtung durchgeführt. Die optische Anregung der Proben erfolgte dabei entweder mit dem weißen Licht einer Halogenlampe mit einer Farbtemperatur von ≈ 3000 K (Halleffekt-Messungen) oder mit einer weißen Leuchtdiode (Photoleitfähigkeitsmessungen) bei unterschiedlichen Anregungsintensitäten. Die Photoleitfähigkeit σ_{ph} ist hierbei definiert als die Differenz zwischen der Leitfähigkeit unter Beleuchtung und der Dunkelleitfähigkeit σ_d . Abb. 3.16 zeigt die Photoleitfähigkeit σ_{ph} festphasenkristallisierter poly-Si Schichten als Funktion der inversen Temperatur T^{-1} , gemessen von hohen zu tiefen Temperaturen. Dargestellt sind die Ergebnisse für Filme auf Corning Glas bei verschiedenen Depositionstemperaturen T_d sowie zum Vergleich für eine repräsentative Schicht auf

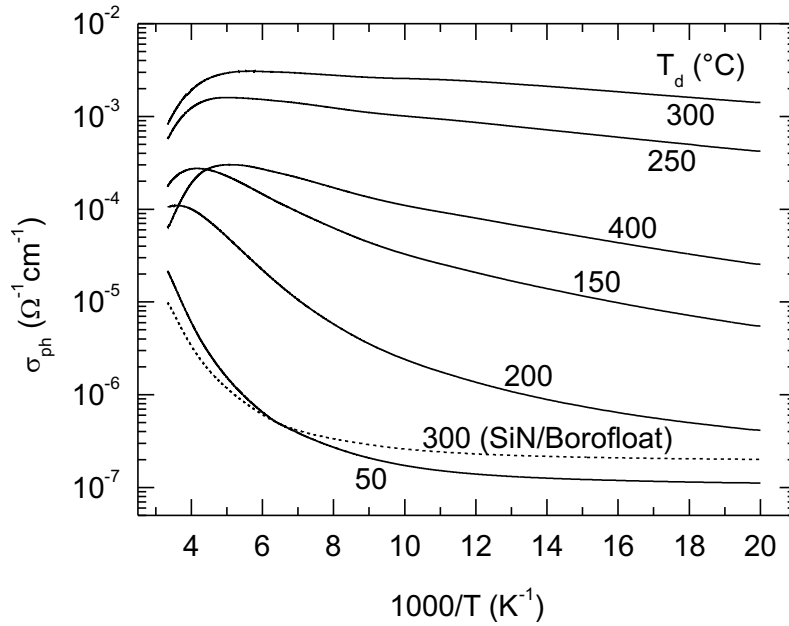


Abbildung 3.16: Photoleitfähigkeit σ_{ph} als Funktion der inversen Messtemperatur T^{-1} für festphasenkristallisierte poly-Si Schichten auf Corning Glas (durchgezogene Linien) und auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas (punktierte Linie) für unterschiedliche Depositionstemperaturen T_d .

SiN-beschichtetem Borofloat Glas, abgeschieden bei $T_d = 300$ $^{\circ}\text{C}$. In Übereinstimmung mit den bereits vorgestellten Ergebnissen zeigt auch die Photoleitfähigkeit eine ähnliche Abhängigkeit von der Depositionstemperatur der amorphen Ausgangsschichten. σ_{ph} nimmt mit steigender Depositionstemperatur zunächst bis zu $T_d = 300$ $^{\circ}\text{C}$ zu und fällt dann mit weiter steigender Depositionstemperatur wieder ab. Die Photoleitfähigkeit variiert dabei zwischen $\sigma_{ph} \approx 2.2 \cdot 10^{-5} (\Omega \text{cm})^{-1}$ und $\sigma_{ph} \approx 8.2 \cdot 10^{-4} (\Omega \text{cm})^{-1}$ bei $T = 300$ K und zeigt zudem eine deutliche Temperaturabhängigkeit. Der Temperaturverlauf der Photoleitfähigkeit kann in 3 unterschiedliche Regionen unterteilt werden: Ausgehend von hohen Temperaturen steigt σ_{ph} zunächst mit der inversen Temperatur T^{-1} bis zu einem Maximum bei der Temperatur T_{max} an. In diesem Bereich liegt die Photoleitfähigkeit aller untersuchten Proben immer unterhalb der entsprechenden Dunkelleitfähigkeit σ_d . Für $T < T_{max}$ fällt $\log(\sigma_{ph})$ dann zunächst proportional zu T^{-1} und anschließend mit stetig abnehmender Steigung weiter ab. Für die bei $T_d = 50$ $^{\circ}\text{C}$ auf Corning Glas und die auf Borofloat Glas abgeschiedenen poly-Si Schichten wird σ_{ph} zu tiefen Temperaturen hin sogar temperaturunabhängig. Von dem zuvor beschriebenen Verhalten weichen nur die bei $T_d = 250$ $^{\circ}\text{C}$ und $T_d = 300$ $^{\circ}\text{C}$ auf Corning Glas depo-

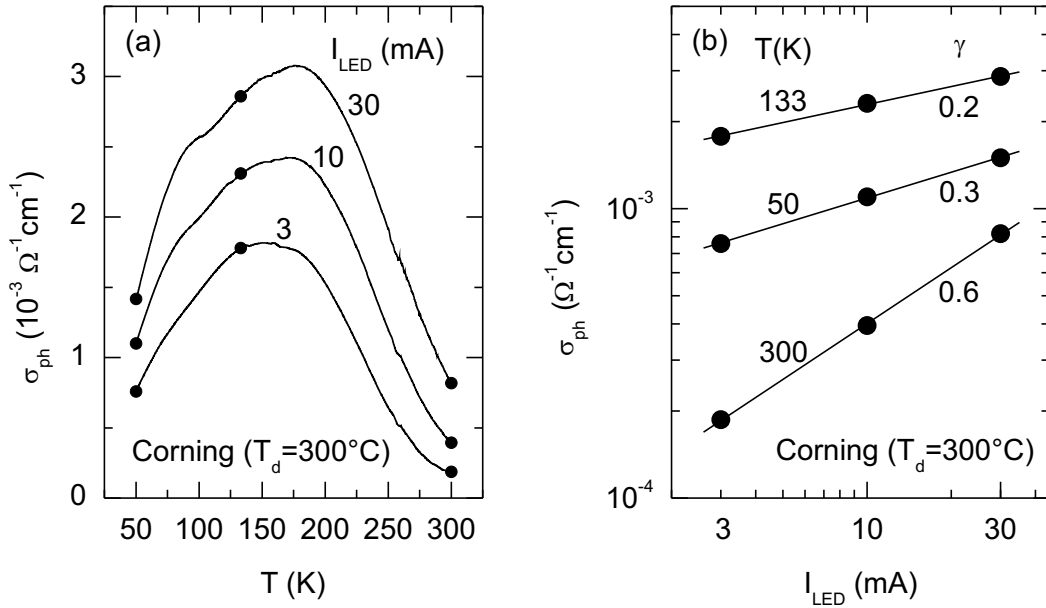


Abbildung 3.17: Photoleitfähigkeit σ_{ph} (a) als Funktion der Messtemperatur T für unterschiedliche LED-Vorwärtsströme I_{LED} und (b) als Funktion des LED-Vorwärtsstroms bei unterschiedlichen Messtemperaturen. Die Geraden sind Anpassungen gemäß Gleichung 3.8 mit den jeweils angegebenen Intensitätsexponenten γ .

nierten poly-Si Filme ab, für die $\log(\sigma_{ph})$ im gesamten Temperaturbereich $T < T_{max}$ proportional zu T^{-1} ist. Um den Einfluss der Beleuchtungsintensität auf die Photoleitfähigkeit zu untersuchen wurden identische Messungen bei unterschiedlichen Intensitäten durchgeführt. Abb. 3.17 (a) veranschaulicht den Einfluss der Beleuchtungsintensität auf die Photoleitfähigkeit der bei $T_d = 300^\circ\text{C}$ auf Corning Glas abgeschiedenen poly-Si Schicht. Die Variation der Beleuchtungsstärke erfolgte dabei über den Vorwärtsstrom der Leuchtdiode I_{LED} , der proportional zur abgestrahlten Lichtintensität ist. Wie Abb. 3.17 (b) zeigt, lässt sich die Intensitätsabhängigkeit der Photoleitfähigkeit gut durch eine Potenzfunktion der Form

$$\sigma_{ph}(I) \propto I^\gamma \quad (3.8)$$

beschreiben, wobei der Intensitätsexponent γ eindeutig von der Temperatur abhängt. In Abb. 3.18 ist der Intensitätsexponent γ für alle in Abb. 3.16 gezeigten poly-Si Schichten als Funktion der inversen Temperatur dargestellt. Die Werte von γ liegen im Bereich $0.2 \leq \gamma \leq 1.0$ und zeigen eine ausgeprägte Abhängigkeit sowohl von den Probenparametern als auch von der Temperatur. Das Temperaturverhalten des Intensitätsexponenten

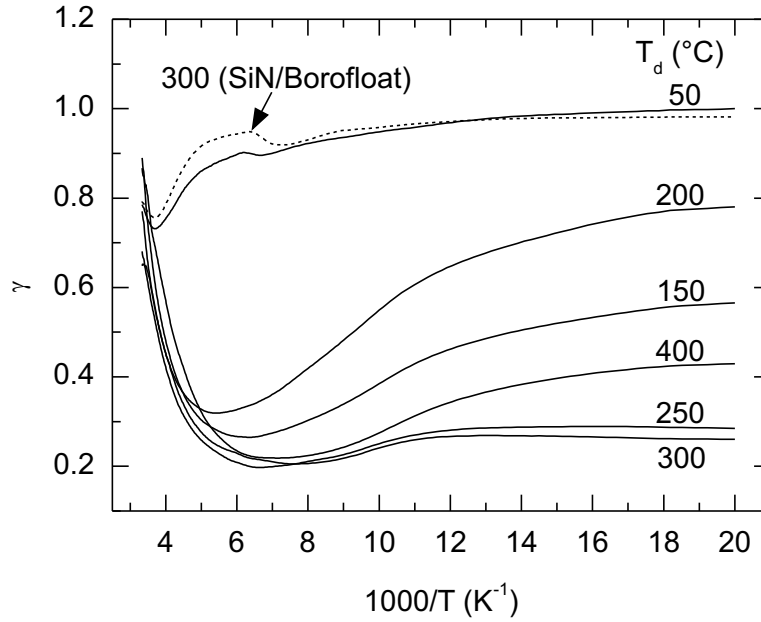


Abbildung 3.18: Intensitätsexponent der Photoleitfähigkeit γ als Funktion der inversen Messtemperatur T^{-1} für festphasenkristallisierte poly-Si Schichten auf Corning Glas (durchgezogene Linien) und auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas (punktierte Linie) für unterschiedliche Depositionstemperaturen T_d .

kann ebenfalls in 3 unterschiedliche Bereiche unterteilt werden: Beginnend bei hohen Temperaturen fällt γ für alle Schichten zunächst stark mit T^{-1} bis zu einem Minimum bei der Temperatur $T_{\min}$ ab. Für $T < T_{\min}$ steigt γ wieder langsam mit T^{-1} an und ist bei tiefen Temperaturen dann konstant (Corning, $T_d = 250\text{ °C}$ und 300 °C) bzw. nähert sich asymptotisch einem festen Wert an. Ein ähnliches Temperaturverhalten sowohl der Photoleitfähigkeit als auch des Intensitätsexponenten wird u.a. auch für amorphes Silizium [80], mikrokristallines Silizium [81] und andere amorphe Halbleiter wie z.B. $\alpha\text{-As}_2\text{Se}_3$ [82] beobachtet und kann mittels theoretischer Berechnungen mit der Rekombination photogenerierter Ladungsträger über Defektniveaus in der Bandlücke korreliert werden [83].

Die Temperaturabhängigkeit der Photoleitfähigkeit jeder Schicht wurde jeweils zweimal mit entgegengesetzten Temperaturrampen gemessen. Die erste Messung erfolgte dabei von hohen zu tiefen Temperaturen (T_{down}) und die zweite Messung direkt im Anschluss von tiefen zu hohen Temperaturen (T_{up}). Auffällig an den in Abb. 3.19 (a) dargestellten Ergebnissen ist, dass die mit entgegengesetzten Temperaturrampen

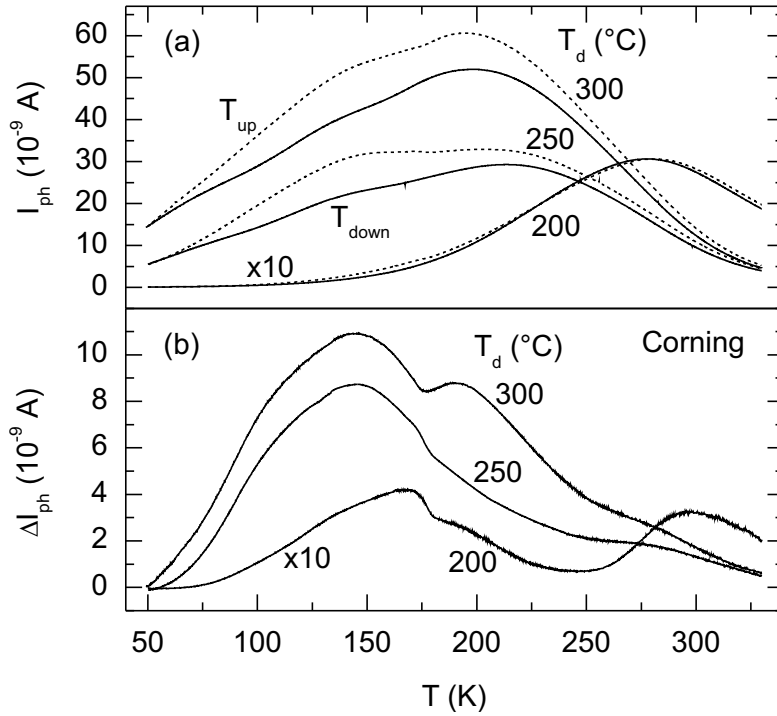


Abbildung 3.19: (a) Photostrom I_{ph} als Funktion der Temperatur T gemessen von hohen zu tiefen (durchgezogene Linie) bzw. von tiefen zu hohen Temperaturen (gestrichelte Linie) für festphasenkristallisierte poly-Si Schichten auf Corning Glas, deponiert bei $T_d = 200\text{ °C}$, 250 °C und 300 °C . (b) Zugehörige Differenz der Photoströme beider Messungen ΔI_{ph} als Funktion der Temperatur T .

gemessenen $I_{\text{ph}}(T)$ -Kurven eine deutliche Hysterese aufweisen. Über einen großen Temperaturbereich ist $I_{\text{ph,up}}(T)$ (gestrichelte Linie) erkennbar höher als $I_{\text{ph,down}}(T)$ (durchgezogene Linie) und nur zu den Grenzen des untersuchten Temperaturbereichs nähern sich die beiden Kurven einander an. Am deutlichsten ist dieses Verhalten für die bei $T_d = 300\text{ °C}$ auf Corning Glas deponierte Schicht. Um das unterschiedliche Temperaturverhalten der Photoleitfähigkeit zu verdeutlichen ist in Abb. 3.19 (b) die Differenz $\Delta I_{\text{ph}} = I_{\text{ph,up}} - I_{\text{ph,down}}$ der Photoströme als Funktion der Temperatur dargestellt. Für die bei $T_d \leq 150\text{ °C}$ und $T_d \geq 400\text{ °C}$ abgeschiedenen Schichten ist kein Unterschied zwischen $I_{\text{ph,up}}$ und $I_{\text{ph,down}}$ erkennbar. Die bei $T_d = 300\text{ °C}$ deponierte Schicht zeigt mit einem Maximalwert von $\Delta I_{\text{ph}} \approx 11 \cdot 10^{-9}\text{ A}$ dagegen die größte Photostromdifferenz. Im Verlauf von $\Delta I_{\text{ph}}(T)$ sind für die bei $T_d = 200\text{ °C}$, $T_d = 250\text{ °C}$ und $T_d = 300\text{ °C}$ abgeschiedenen poly-Si Proben mehrere Maxima deutlich erkennbar, deren Position und relative Intensität mit der Depositionstemperatur variiert. Für die bei $T_d = 300\text{ °C}$

deponierte poly-Si Schicht liegen diese Maxima z.B. um 110 K, 150 K, 190 K und 275 K. Der bei $T_d = 200\text{ °C}$ abgeschiedene Film zeigt zusätzlich ein ausgeprägtes Maximum um 300 K. Wie die Ergebnisse thermisch stimulierter Strommessungen (TSC) zeigen (siehe Kapitel 3.3.1), basiert der Unterschied im Photostrom mit großer Wahrscheinlichkeit auf einer Umladung von Defektzuständen in der Bandlücke. Die unter Beleuchtung erzeugten Überschussladungsträger werden ständig in Defektzustände eingefangen und aus diesen auch wieder emittiert. Nimmt die Temperatur wie bei der ersten Photoleitfähigkeitsmessung ab, so können die Ladungsträger irgendwann nicht mehr thermisch emittiert werden und bleiben in den entsprechenden Defektzuständen „eingefroren“. Während der zweiten Photoleitfähigkeitsmessung von tiefen zu hohen Temperaturen werden die Ladungsträger dann wieder thermisch emittiert und tragen zusätzlich zum gemessenen Photostrom $I_{\text{ph,up}}$ bei, der dadurch gegenüber $I_{\text{ph,down}}$ erhöht ist. Die Temperatur, bei der die Ladungsträgeremission maximal wird, hängt dabei sowohl von der energetischen Lage des entsprechenden Defektes als auch von seinem Einfangquerschnitt ab. Die Tatsache, dass in Abb. 3.19 eindeutig mehrere Maxima zu erkennen sind deutet auf Defekte mit unterschiedlichen Energien und/oder Einfangquerschnitten in den untersuchten festphasenkristallisierten poly-Si Schichten hin [84].

Um den Einfluss der Beleuchtung auf die Ladungsträgerkonzentration und die Ladungsträgerbeweglichkeit zu untersuchen und daraus weitere Erkenntnisse über Potentialbarrieren an den Korngrenzen und die Ladungsträgerverarmung innerhalb der Körner zu gewinnen, wurden Halleffektmessungen bei $T = 300\text{ K}$ unter Beleuchtung durchgeführt. Im Gegensatz zu den zuvor vorgestellten Photoleitfähigkeitsuntersuchungen wurde als Lichtquelle keine LED, sondern eine Halogenlampe mit einem mechanischen Intensitätsabschwächer verwendet. Auch unter optischer Anregung zeigen alle poly-Si Schichten weiterhin Löcherleitung. Abb. 3.20 zeigt die normierte Änderung der Ladungsträgerkonzentration bei $T = 300\text{ K}$ als Funktion der relativen Beleuchtungsintensität. Während sich die Ladungsträgerkonzentration der bei $T_d = 300\text{ °C}$ und $T_d = 500\text{ °C}$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Schichten im untersuchten Intensitätsbereich nicht ändert, nimmt n für die bei $T_d = 50\text{ °C}$ auf Corning Glas bzw. für alle auf SiN/Borofloat Glas abgeschiedenen Schichten klar mit steigender Beleuchtungsintensität zu. Das unterschiedliche Verhalten von $n_{\text{light}}/n_{\text{dark}}$ folgt aus der stark variierenden Dunkelladungsträgerkonzentration n_{dark} in den verschiedenen Schichten. Für poly-Si Filme auf SiN/Borofloat Glas und für die bei $T_d = 50\text{ °C}$ auf Corning Glas deponierte Schicht ist diese deutlich geringer als die Konzentration der

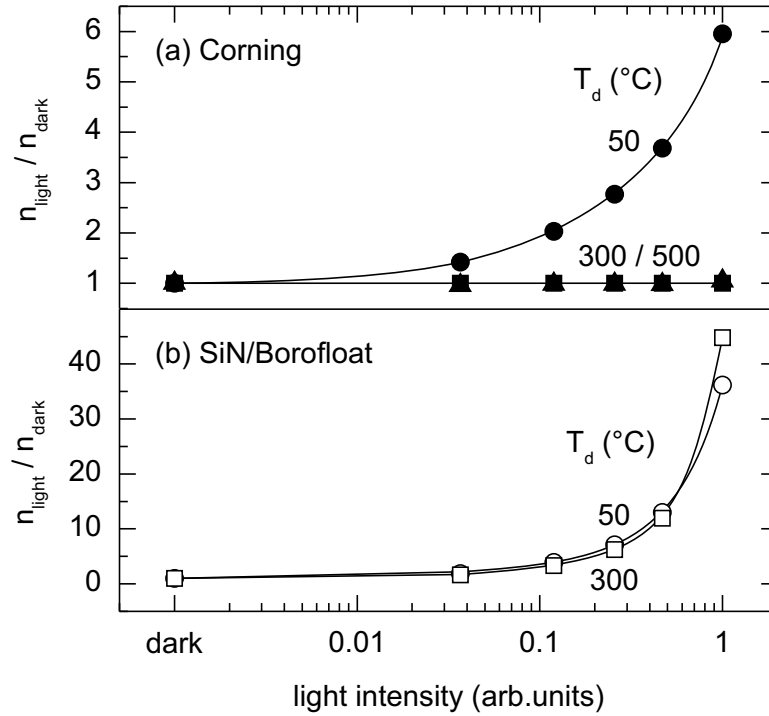


Abbildung 3.20: Normierte Änderung der Ladungsträgerkonzentration $n_{\text{light}}/n_{\text{dark}}$ unter Beleuchtung als Funktion der relativen Beleuchtungsintensität für festphasenkristallisiertes poly-Si auf (a) Corning Glas und (b) SiN/Borofloat Glas.

zusätzlichen photogenerierten Ladungsträger $n_{\text{light}} - n_{\text{dark}} \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, so dass diese Schichten eine beobachtbare Änderung der relativen Ladungsträgerkonzentration $n_{\text{light}}/n_{\text{dark}}$ bei Beleuchtung zeigen. Die übrigen poly-Si Schichten haben dagegen eine Dunkelladungsträgerkonzentration von $n_{\text{dark}} > 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ und zeigen somit keine messbare Änderung von $n_{\text{light}}/n_{\text{dark}}$ bei Beleuchtung. Die Zunahme von n verdeutlicht also nur die stärkere Ladungsträgerverarmung in den entsprechenden poly-Si Schichten. Deutlich interessanter ist dagegen der Einfluss der optischen Anregung auf die Beweglichkeit der Ladungsträger in den Schichten. In Abb. 3.21 ist die zugehörige normierte Änderung der Hallbeweglichkeit von festphasenkristallisiertem poly-Si bei $T = 300 \text{ K}$ als Funktion der relativen Beleuchtungsintensität dargestellt. Bei allen untersuchten poly-Si Schichten auf Corning Glas nimmt μ_H mit steigender Lichtintensität leicht zu. Die größte Änderung wird dabei für den bei $T_d = 50 \text{ °C}$ deponierten poly-Si Film beobachtet, während die Beweglichkeit der bei $T_d = 300 \text{ °C}$ abgeschiedenen poly-Si Schicht am Geringsten beeinflusst wird. Im deutlichen Gegensatz dazu zeigen alle

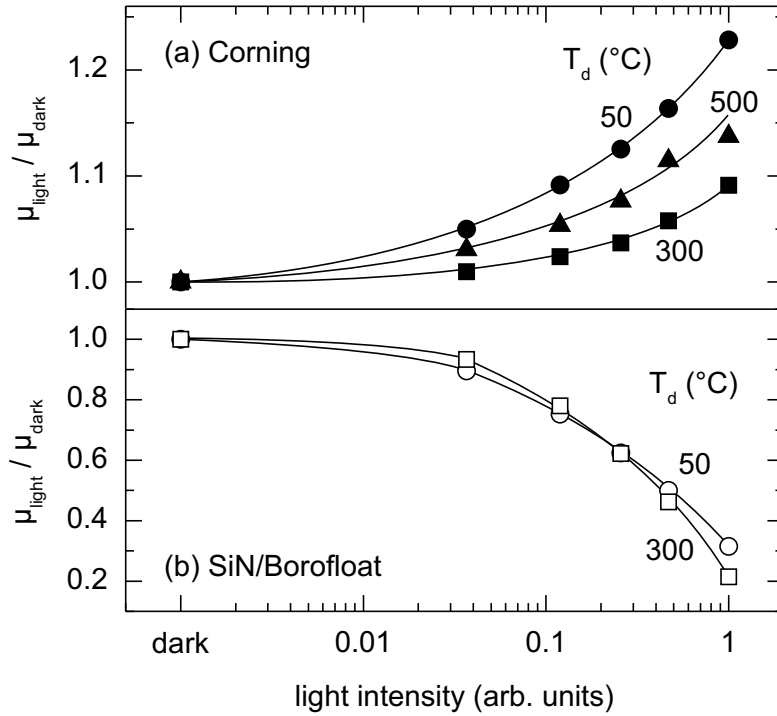


Abbildung 3.21: Normierte Änderung der Hallbeweglichkeit $\mu_{\text{light}} / \mu_{\text{dark}}$ unter Beleuchtung als Funktion der relativen Beleuchtungsintensität für festphasenkristallisiertes poly-Si auf (a) Corning Glas und (b) SiN/Borofloat Glas.

polykristallinen Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas, nahezu unabhängig von der Depositionstemperatur, eine starke Abnahme der Beweglichkeit unter Beleuchtung. Die auf Corning Substrat beobachtete Zunahme der Ladungsträgerbeweglichkeit bei Beleuchtung ist typisch für den durch Korngrenzenbarrieren limitierten Ladungstransport in polykristallinen Halbleitern [85, 86] und kann wie folgt erklärt werden. Die unter Beleuchtung erzeugten Minoritätsladungsträger (Elektronen) driften aufgrund der vorhandenen Potentialsenken zu den Korngrenzen und kompensieren teilweise die dort akkumulierten Majoritätsladungsträger. Die hierdurch bedingte Verringerung der Potentialbarrieren führt dann zu einer Zunahme der Beweglichkeit. Unter der Annahme, dass der Ladungstransport sowohl bei Beleuchtung als auch im Dunkeln durch den gleichen thermisch aktivierten Prozess beschrieben werden kann, lässt sich der in Abb. 3.21 (a) dargestellte Zunahme von μ_H gemäß Gleichung 3.6 eine Abnahme der Aktivierungsenergie E_A^μ zuordnen. Abb. 3.22 zeigt die auf diese Weise ermittelte Änderung der Aktivierungsenergie ΔE_A^μ in Abhängigkeit von der relativen Beleuchtungsintensität

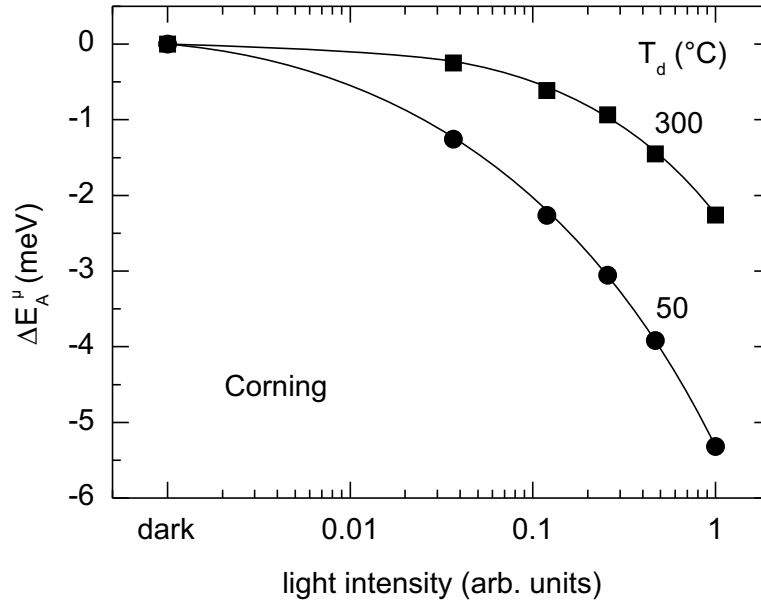


Abbildung 3.22: Änderung der Aktivierungsenergie E_A^μ der bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ und $T_d = 300^\circ\text{C}$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Schichten als Funktion der relativen Beleuchtungsintensität.

für die bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ und $T_d = 300^\circ\text{C}$ auf Corning Glas abgeschiedenen Filme. Der Einfluss der Beleuchtung auf die Barrierenhöhe ist dabei für die bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ deponierte Probe deutlich stärker, was auf größere Potentialbarrieren im Vergleich zu der bei $T_d = 300^\circ\text{C}$ deponierten Schicht schließen lässt [87–89].

Die für Schichten auf SiN/Borofloat Glas beobachtete Abnahme von μ_H unter Beleuchtung ist dagegen ein für polykristallines Material ungewöhnliches Ergebnis und deutet wie auch schon die Ergebnisse der temperaturabhängigen Halluntersuchungen in Kapitel 3.2.1 auf einen nicht durch Korngrenzen limitierten Transport hin. Eine mögliche Erklärung für die Abnahme von μ_H könnte eine lichtinduzierte Umladung von Defekten sein, die zu einem Anstieg der Streuung an ionisierten Störstellen und so zu einer Verringerung der Beweglichkeit führt.

3.3 Defektcharakterisierung

3.3.1 Thermisch stimulierte Ströme (TSC)

Wird die Photoleitfähigkeit zunächst von hohen zu tiefen und direkt im Anschluss von tiefen zu hohen Temperaturen gemessen, so liegt die Photoleitfähigkeit der ersten Mes-

sung in einem breiten Temperaturbereich über der der zweiten Messung (siehe Kapitel 3.2.2). Die beobachtete Hysterese kann z.B. damit erklärt werden, dass photogenerierte Überschussladungsträger bei der ersten Messung in lokalisierten Defektzuständen in der Bandlücke „eingefroren“ und während der zweiten Messung wieder thermisch emittiert werden. Die thermisch emittierten Ladungsträger liefern dann einen zusätzlichen Strombeitrag, durch den der gemessene Photostrom vergrößert erscheint. Eine genauere Untersuchung dieses Strombeitrags erfolgte mittels der Methode der thermisch stimulierten Ströme. Hierfür wurde die bei $T_d = 300\text{ °C}$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Schicht zunächst im Dunkeln bis zu einer Temperatur $T_0 = 40\text{ K}$ abgekühlt und anschließend für $t = 10\text{ min}$ mit einer weißen LED beleuchtet. Nach einer weiteren Relaxationszeit von $t = 10\text{ min}$ im Dunkeln, in der der Photostrom auf einen stationären Wert abgeklungen war, wurde die Probe dann mit einer konstanten Heizrate $dT/dt = 100\text{ mK/s}$ erwärmt und der Strom $I(T)$ gemessen. Zur Bestimmung des thermisch stimulierten Strombeitrags $I_{\text{TSC}}(T)$ wurde von der so bestimmten $I(T)$ -Kurve im Anschluss der Dunkelstrom $I_d(T)$ aus einer identischen Messung ohne vorherige Beleuchtung subtrahiert. Abb. 3.23 zeigt das TSC-Spektrum, d.h. den thermisch stimulierten Strom I_{TSC} als Funktion der Messtemperatur T (graue Linie). Sowohl die Gesamtbreite als auch die Form des Spektrums deuten dabei auf eine Überlagerung mehrerer Emissionsmaxima hin. Um diese Maxima einzeln aufzulösen wurde das Spektrum mit einer unterschiedlichen Anzahl von Gaußfunktionen angepasst. Das beste Ergebnis einer solchen Anpassung mit insgesamt 5 Gaußkurven (gestrichelte Linien) ist in Abb. 3.23 als durchgezogene Linie dargestellt und stimmt hervorragend mit dem gemessenen Spektrum (graue Linie) überein. Um auch die physikalische Existenz der unterschiedlichen Emissionsmaxima nachzuweisen kann eine als thermische Reinigung („thermal cleaning“) bezeichnete Methode angewendet werden. Hierbei wird die Probe nach der Beleuchtung zunächst nur bis zu einer Temperatur $T_1 > T_0$ knapp oberhalb eines der vermuteten Emissionsmaxima erwärmt und dann wieder bis auf T_0 abgekühlt. Während der Erwärmung werden flache Haftstellen, die zu den beobachteten Maxima unterhalb von T_1 führen, thermisch entleert und tragen somit nicht mehr zum thermisch stimulierten Strom in der nachfolgenden TSC-Messung bei. Die ersten Ergebnisse entsprechender Untersuchungen bestätigen die aus der Anpassung des Spektrums (siehe Abb. 3.23) ermittelten Positionen der Emissionsmaxima.

Für die Analyse von TSC-Spektren existiert in der Literatur eine Vielzahl mehr oder weniger komplexer Methoden (für einen Überblick siehe z.B. [90]). Die Bestimmung

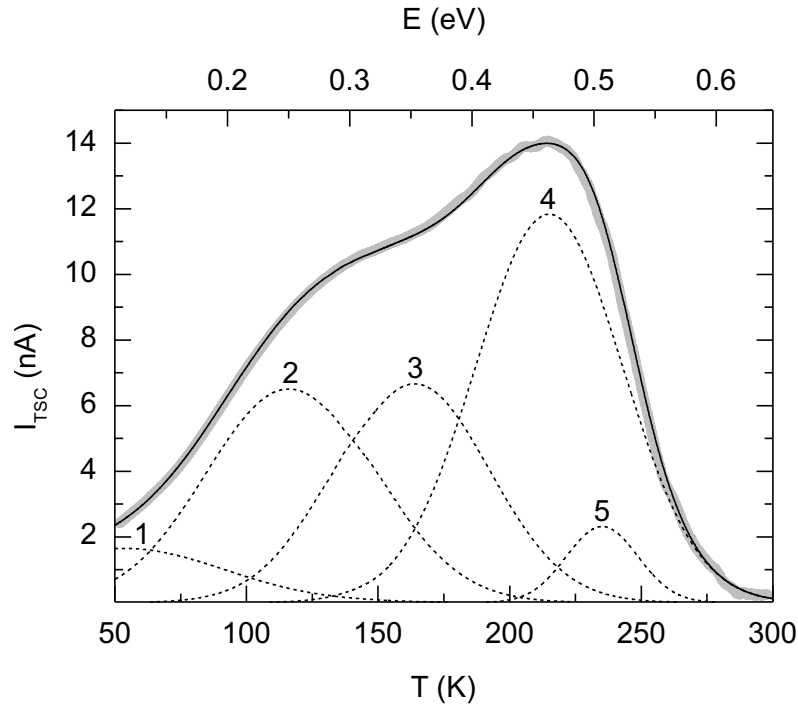


Abbildung 3.23: Thermisch stimulierter Strom I_{TSC} der bei $T_d = 300\text{ °C}$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Schicht als Funktion der Messtemperatur T (graue Kurve) sowie Anpassung des TSC-Spektrums (schwarze Linie) mit 5 Gaußkurven (gestrichelte Linien).

der energetischen Lage E_t der hier beobachteten Haftstellen erfolgt entsprechend der Methode von Bube [91] über die Position der Strommaxima T_m gemäß

$$E_t = \underbrace{\ln \left(\frac{N_{\text{C/V}} S_t v k T_m^2}{\beta E_t} \right)}_n \cdot k T_m \quad (3.9)$$

Hierbei ist $N_{\text{C/V}}$ die effektive Zustandsdichte im Leitungs- (für Elektronenhaftstellen) oder Valenzband (für Löcherhaftstellen), S_t der Einfangquerschnitt des Defektzentrums, v die thermische Geschwindigkeit der Ladungsträger und $\beta = dT/dt$ die Heizrate. Für typische Werte dieser Parameter variiert der Faktor n nur im Bereich $20 \leq n \leq 30$, weshalb für eine sinnvolle Abschätzung der Defektenergie E_t folgende vereinfachte Relation verwendet werden kann [92–94]

$$E_t = 25 \cdot k T_m \quad (3.10)$$

TSC-Maximum	T_m (K)	E_t (eV)	Q (C)	$N = Q/q$	N_t (cm ⁻³)
1	54	0.12	$8.54 \cdot 10^{-7}$	$5.33 \cdot 10^{12}$	$1.97 \cdot 10^{17}$
2	117	0.25	$5.01 \cdot 10^{-6}$	$3.16 \cdot 10^{13}$	$1.17 \cdot 10^{18}$
3	162	0.35	$4.81 \cdot 10^{-6}$	$3.00 \cdot 10^{13}$	$1.11 \cdot 10^{18}$
4	214	0.46	$8.38 \cdot 10^{-6}$	$5.23 \cdot 10^{13}$	$1.93 \cdot 10^{18}$
5	234	0.50	$7.98 \cdot 10^{-7}$	$4.98 \cdot 10^{12}$	$1.84 \cdot 10^{17}$
Σ	-	-	$1.99 \cdot 10^{-5}$	$1.24 \cdot 10^{14}$	$4.59 \cdot 10^{18}$

Tabelle 3.3: Ergebnisse der Auswertung thermisch stimulierter Strommessungen an der bei $T_d = 300$ °C auf Corning Glas deponierten poly-Si Schicht. T_m ist die Temperatur des Strommaximums, E_t ist die Aktivierungsenergie des Defekts, Q und N sind die freigesetzte Ladung bzw. die Anzahl freigesetzter Ladungsträger und N_t ist die Defektkonzentration.

Die sich aus dieser Beziehung ergebende Energieskala ist an der oberen Achse in Abb. 3.23 angegeben und die Aktivierungsenergien der einzelnen TSC-Maxima sind in Tabelle 3.3 zusammengefasst. Eine genauere Bestimmung der energetischen Lage der Defektzentren mittels weiterer Analysemethoden ist Gegenstand aktueller Untersuchungen. Neben der energetischen Lage der Defekte lässt sich aus einem TSC-Spektrum auch die entsprechende Konzentration der Defekte bestimmen. Hierfür muss zunächst aus der integralen Fläche unter dem TSC-Maximum gemäß

$$Q = \int_{t_A}^{t_E} I_{\text{TSC}}(t) dt = \frac{1}{\beta} \int_{T_A}^{T_E} I_{\text{TSC}}(T) dT \quad (3.11)$$

die während der TSC-Messung im Zeitintervall $t_A \leq t \leq t_E$ bzw. im Temperaturbereich $T_A \leq T \leq T_E$ emittierte Ladung Q ermittelt werden. Unter der Annahme, dass während der optischen Anregung alle Haftstellen vollständig mit Ladungsträgern gefüllt wurden, ist Q proportional zur Defektkonzentration und es gilt [95]

$$N_t = \frac{Q}{qVG} \quad (3.12)$$

Hierbei ist V das optisch angeregte Probenvolumen und G die lichtelektrische Leitfähigkeitsverstärkung, die als Verhältnis der Anzahl am Stromtransport beteiligter photogenerierter Ladungsträger zur Anzahl einfallender Photonen definiert ist. Für die

Berechnung von N_t in der hier untersuchten poly-Si Schicht wurde von einer homogenen optischen Anregung der gesamten Schicht ($V \approx 2.7 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^3$) und von $G = 1$ [96, 97] ausgegangen. Die auf diese Weise bestimmten Defektkonzentrationen sowie die während der TSC-Messung freigesetzte Ladung Q und die Anzahl der emittierten Ladungsträger sind für die verschiedenen TSC-Maxima ebenfalls in Tabelle 3.3 angegeben. Hierbei fällt auf, dass die ermittelte Gesamtdefektkonzentration mit $N_t \approx 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ einen physikalisch unrealistischen Wert annimmt. Eine mögliche Erklärung für die zu hohen Defektkonzentrationen könnte der Einfluss der Beweglichkeit sein. Für die Bestimmung der Ladung aus der Fläche unter der TSC-Kurve wird implizit davon ausgegangen, dass die (temperaturabhängige) Beweglichkeit während der Dunkel- und der TSC-Messung identisch ist. Aufgrund der bei Halleffektmessungen unter Beleuchtung beobachteten Änderung von μ (siehe Kapitel 3.2.2) ist davon auszugehen, dass diese Annahme hier nicht gilt. Folglich hängt der Strom $I_{\text{TSC}}(T)$ auch von der Ladungsträgerbeweglichkeit ab und die Fläche unter der TSC-Kurve ist nicht mehr proportional zur Ladung Q und somit zur Anzahl der aus Haftstellen emittierten Ladungsträger. Eine genaue Klärung dieses Sachverhalts ist Gegenstand aktueller Untersuchungen.

Ein Vergleich mit der Literatur zeigt, dass sehr ähnliche Defektenergien auch von anderen Autoren für TSC-Messungen an Silizium berichtet werden: Schade und Herrick [93] finden in n-typ c-Si insgesamt 4 Defektzentren bei $E_t = 0.20 \text{ eV}$, 0.26 eV , 0.32 eV und 0.41 eV mit einer Gesamtkonzentration von $N_t \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, die sie metallischen Verunreinigungen (Ni, Cu, Zn und Fe) zuordnen. Muller *et al.* [98] beobachten in laserkristallisiertem poly-Si zwei Defektzentren bei $E_t \approx 0.18 \text{ eV}$ und $\approx 0.23 \text{ eV}$, die auch mittels Kapazitätstransientenspektroskopie („deep level transient spectroscopy“, DLTS) verifiziert werden. Für a-Si werden von Fuhs und Milleville [99] zwei Defektzentren bei $E_t = 0.35 \text{ eV}$ und 0.48 eV gefunden und Misra *et al.* [100] berichten von einem dominierenden Zentrum bei $E_t \approx 0.45 \text{ eV}$.

3.3.2 Elektronenspinresonanz (ESR)

Eine der wesentlichen Ursachen für die Entstehung von Korngrenzenbarrieren in polykristallinem Material sind strukturelle Defekte in den kristallographisch gestörten Bereichen der Korngrenzen. In polykristallinem Silizium spielen dabei insbesondere Si Dangling-Bonds wegen ihrer energetischen Lage in der Bandlückenmitte eine entscheidende Rolle. Die Konzentration paramagnetischer Dangling-Bond Defekte in festphasenkristallisiertem poly-Si wurde mittels Elektronenspinresonanz bei $T = 300 \text{ K}$

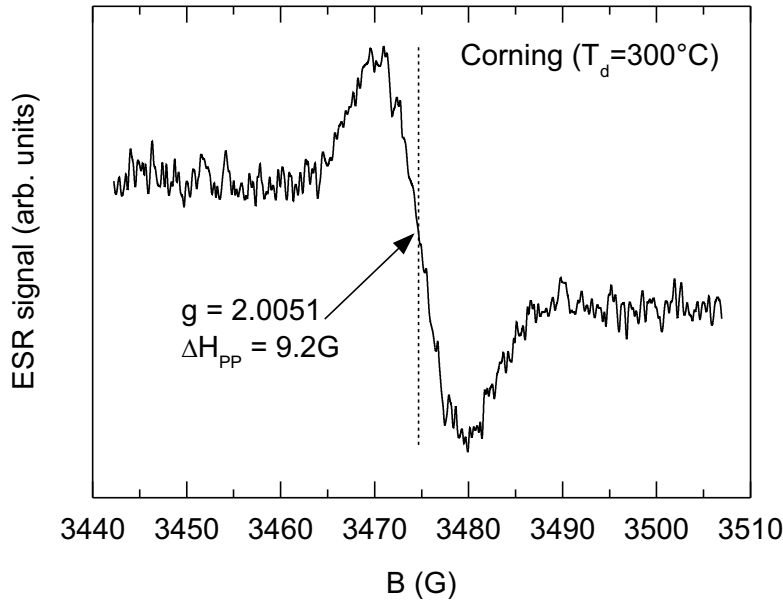


Abbildung 3.24: ESR-Spektrum bei $T = 300$ K von festphasenkristallisiertem poly-Si auf Corning Glas, abgeschieden bei $T_d = 300$ °C.

untersucht. Aufgrund zu starker Hintergrundsignale sowohl aus der SiN-Schicht als auch aus dem oxidierten Wafer konnten ESR-Messungen nur an poly-Si Schichten auf Corning Glas durchgeführt werden. Ein typisches ESR-Spektrum für die bei $T_d = 300$ °C auf Corning Glas deponierte poly-Si Schicht ist in Abb. 3.24 dargestellt. Die ESR-Resonanz hat einen g -Wert von $g = 2.0051$, eine Breite von $\Delta H_{PP} \approx 9.2$ G und zeigt keine systematische Abhängigkeit von T_d . Das starke Untergrundsignal in Abb. 3.24 wird auch bei Messungen an reinem Corning Glas beobachtet und kann somit eindeutig dem Substrat zugeordnet werden. Die Bestimmung der absoluten Spinanzahl erfolgte durch Vergleich der ESR-Intensitäten der poly-Si Schichten mit einem a-Si Spinstandard. Für die Berechnung der Spindichte N_S aus der gemessenen absoluten Spinanzahl wurde eine homogene Verteilung der Spins im Probenvolumen $V \approx 3 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^3$ angenommen. Aufgrund des Substratsignals beträgt die minimal detektierbare Spindichte der hier untersuchten poly-Si Schichten auf Corning Glas $N_S \approx 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Abb. 3.25 zeigt N_S bei $T = 300$ K als Funktion der Depositionstemperatur T_d . Zwischen $T_d = 50$ °C und $T_d = 300$ °C ist die Defektdichte zunächst konstant bei $N_S \approx 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ und steigt dann für $T_d \geq 400$ K sprunghaft um etwa einen Faktor 3 auf $N_S \approx 9 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ an. Der plötzliche Anstieg von N_S zwischen $T_d = 300$ °C und $T_d = 400$ °C korreliert dabei mit einer deutlichen Abnahme der mittleren Korngröße. Diese ist für die bei $T_d \geq 400$ °C

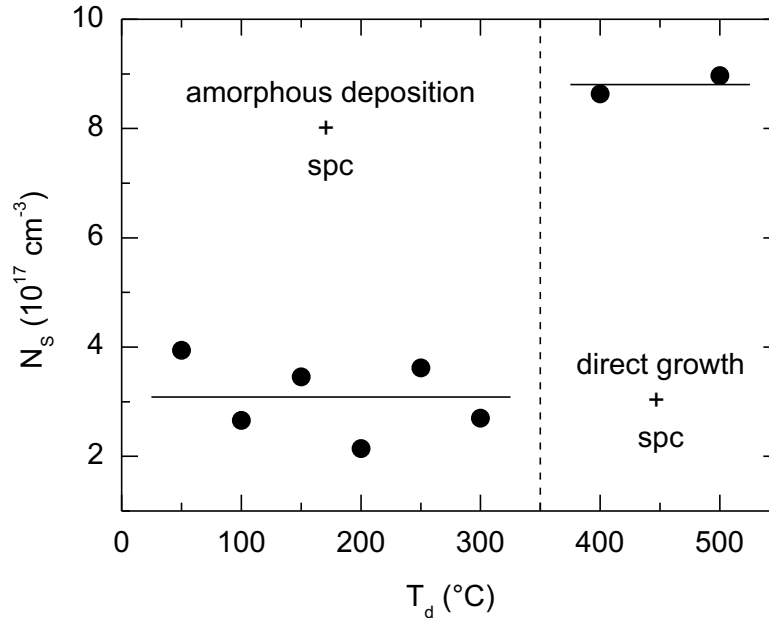


Abbildung 3.25: Spindichte N_S von festphasenkristallisiertem poly-Si auf Corning Glas als Funktion der Depositionstemperatur T_d . Der Übergang zwischen rein amorpher und feinkristalliner Deposition der Ausgangsschichten ist durch eine gestrichelte Linie gekennzeichnet.

direkt kristallin abgeschiedenen Schichten um mehr als eine Größenordnung kleiner als für die bei $T_d \leq 300$ °C rein amorph deponierten poly-Si Schichten (siehe Kapitel 3.1). Eine ähnliche Relation zwischen Spindichte und Korngröße wird auch für laserkristallisiertes poly-Si beobachtet und von Nickel *et al.* [101] mit einer Zunahme des relativen Korngrenzenvolumenanteils erklärt. Dabei wird davon ausgegangen, dass sich die Defekte bevorzugt in einem Bereich von 2 Gitterebenen um die Korngrenzen befinden und die Defektdichte pro Korngrenzeneinheitenvolumen mehr oder weniger konstant ist. Für eine Abnahme der Korngröße von $d \approx 3 \mu\text{m}$ auf $d \approx 0.1 \mu\text{m}$ ergibt sich nach diesem Modell ein Anstieg der Spindichte um etwa einen Faktor 10. Die hier für festphasenkristallisiertes poly-Si beobachtete deutlich geringere Zunahme von N_S um nur einen Faktor 3 deutet auf eine homogenere Verteilung der Defekte in der Schicht, d.h. einen größeren Anteil von Dangling-Bonds innerhalb der kristallinen Körner, hin. Insgesamt liegt die Defektdichte in den hier untersuchten Schichten dabei z.T. deutlich unter der typischerweise für unpassiviertes poly-Si beobachteten Konzentration von $N_S \approx 1\text{--}5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [102–104].

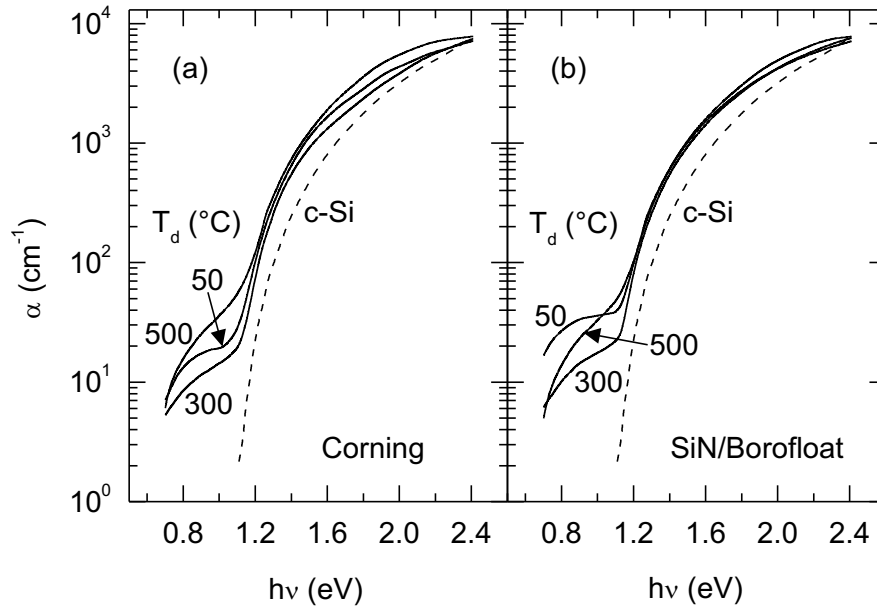


Abbildung 3.26: Absorptionskoeffizient α in Abhängigkeit von der Photonenenergie $h\nu$ von festphasenkristallisiertem Poly-Si auf (a) Corning Glas und (b) SiN-beschichtetem Borofloat Glas für unterschiedliche Depositionstemperaturen T_d . Zum Vergleich ist der Absorptionskoeffizient von c-Si [105] dargestellt (gestrichelte Linie).

3.3.3 Photothermische Deflektionsspektroskopie (PDS)

Zusätzliche Informationen über Defekte bzw. elektronische Zustände innerhalb der Bandlücke von festphasenkristallisiertem poly-Si erhält man aus den optischen Absorptionseigenschaften der Filme. Die Untersuchung der Absorption erfolgte mittels photothermischer Deflektionsspektroskopie. Diese Methode eignet sich aufgrund ihrer hohen Empfindlichkeit insbesondere zur Bestimmung des Absorptionskoeffizienten in dem von Defektabsorption dominierten Photonenenergiebereich unterhalb der Bandlückenenergie. Der Absorptionskoeffizient α von festphasenkristallisiertem poly-Si im Energiebereich $0.7 \text{ eV} \leq h\nu \leq 2.4 \text{ eV}$ ist in Abb. 3.26 dargestellt. Abb. 3.26 (a) zeigt die Ergebnisse für poly-Si Schichten auf Corning Glas für die Depositionstemperaturen $T_d = 50 \text{ °C}$, $T_d = 300 \text{ °C}$ und $T_d = 500 \text{ °C}$. In Abb. 3.26 (b) sind die entsprechenden Ergebnisse für poly-Si Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas dargestellt. Zum Vergleich ist in beiden Abbildungen das Absorptionsverhalten von einkristallinem Si [105] angegeben. Für Photonenenergien im Bereich $1.2 \text{ eV} \leq h\nu \leq 2.4 \text{ eV}$ zeigen die Absorptionskurven von festphasenkristallisiertem poly-Si und einkristallinem Silizium

einen ähnlichen Verlauf. Die Absolutwerte von α liegen im gesamten Energiebereich allerdings über denen von einkristallinem Si, wobei der relative Abstand mit steigender Photonenenergie abnimmt. Für $h\nu \geq 2.4$ eV ist das Absorptionsverhalten der poly-Si Proben identisch zu c-Si. Alle festphasenkristallisierten poly-Si Schichten zeigen zudem eine ausgeprägte Absorption für $h\nu \leq 1.1$ eV, d.h. für Photonenenergien kleiner als die Bandlücke. Der genaue Verlauf von $\alpha(h\nu)$ in diesem Energiebereich wird sowohl von der Depositionstemperatur T_d als auch vom verwendeten Substrat beeinflusst. Die bei $T_d = 50$ °C abgeschiedenen poly-Si Proben zeigen ein deutlich erkennbares Absorptionsmaximum bei $h\nu \approx 0.9$ eV. Für $T_d = 300$ °C ist dieses Maximum schwächer ausgeprägt und für $T_d = 500$ °C fällt α bereits oberhalb der Absorptionskante flach mit der Photonenenergie ab. Beim direkten Vergleich der beiden Substrate fällt insbesondere die stark unterschiedliche Absorption der bei $T_d = 50$ °C deponierten poly-Si Filme auf, die auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas etwa einen Faktor 2 größer ist als auf Corning Glas. Unabhängig vom Substrat zeigen die bei $T_d = 300$ °C abgeschiedenen festphasenkristallisierten poly-Si Schichten die geringste Absorption für Photonenenergien unterhalb der Bandlückenenergie.

Die insgesamt erhöhte Absorption im Vergleich zu einkristallinem Silizium für $h\nu \leq 2.4$ eV ist konsistent mit einer mit dem entsprechenden Volumenanteil gewichteten Überlagerung der Absorptionskoeffizienten der kristallinen Körner und der Korngrenzenregionen [106, 107]. Die in den Korngrenzenregionen vorhandenen Defekte (verspannte und gebrochene Bindungen sowie eventuell segregierte Verunreinigungen) führen lokal zu einer teilweisen Aufhebung der Impulsauswahlregeln und somit zu einer verstärkten „direkten“ Absorption über indirekte Übergänge. Hiermit lässt sich insbesondere die in Abb. 3.26 gezeigte erhöhte Absorption der bei $T_d = 500$ °C deponierten Proben erklären. Diese direkt kristallin abgeschiedenen Filme bestehen aus wesentlich kleineren Kristalliten und haben somit einen höheren Korngrenzenvolumenanteil gegenüber den amorph deponierten und festphasenkristallisierten Schichten. Die ausgeprägte Absorptionsschulter unterhalb der Bandlückenenergie wird sowohl in amorphem [45, 108] als auch in polykristallinem [109] Silizium beobachtet und aufgrund ihrer Korrelation mit der Spindichte der Absorption über neutrale Dangling-Bond Zustände zugeordnet [45]. Eine solche Beziehung wird auch für die hier untersuchten festphasenkristallisierten poly-Si Filme beobachtet. Abb. 3.27 zeigt die integrale Defektabsorption (Fläche A_{PDS} unter dem PDS-Absorptionsmaximum) als Funktion der aus ESR-Messungen ermittelten Spindichte N_S für poly-Si Schichten auf Corning Glas. Der Übergang von Defekt- zu

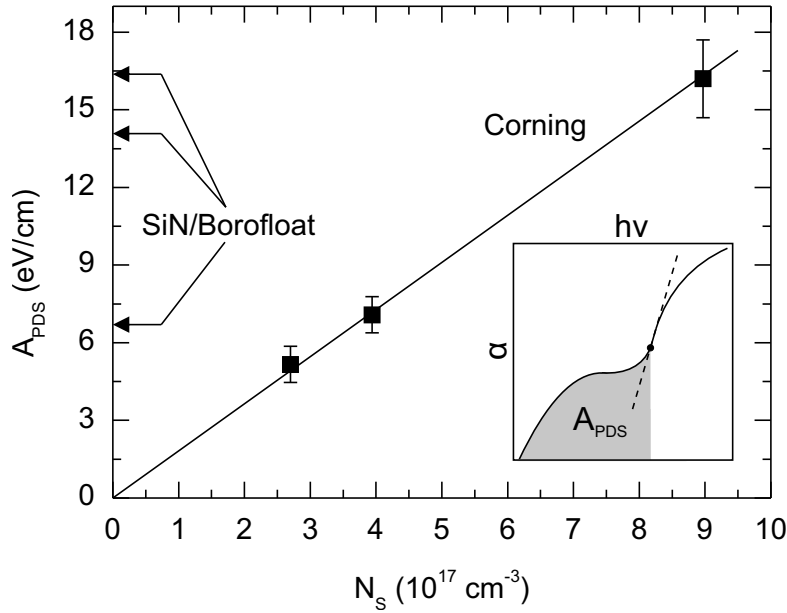


Abbildung 3.27: Integrale PDS-Defektabsorption A_{PDS} als Funktion der mittels ESR-Messungen ermittelten Spindichte (N_S) für festphasenkristallisiertes poly-Si auf Corning Glas. Die eingebettete Abbildung illustriert die Bestimmung der Fläche A_{PDS} .

Bandabsorption (und damit die obere Integrationsgrenze für die Bestimmung von A_{PDS}) ist dabei über die Energie definiert, bei der die Absorption zu kleineren Energien von einem kurzen exponentiellen Verlauf abweicht (siehe eingebettete Grafik in Abb. 3.27). Die häufig für a-Si angewandte Methode, die Defektabsorption mit einer Gaußverteilung anzupassen und A_{PDS} über die Fläche unter dieser Verteilung zu definieren, ist für die Auswertung der hier gezeigten PDS-Spektren von poly-Si nicht sinnvoll. Die Fläche unter einer solchen Verteilung würde für poly-Si (aufgrund der im Vergleich zu a-Si fehlenden bzw. deutlich weniger ausgeprägten Bandausläufer) zu einem großen Teil auch die Band-zu-Band Absorption beinhalten und somit die tatsächliche Defektabsorption deutlich überschätzen. Die Proportionalität zwischen der Defektabsorption und der Spindichte ist gegeben durch:

$$N_S \approx 5.5 \cdot 10^{16} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2} \cdot A_{\text{PDS}} \quad (3.13)$$

Der hier bestimmte Proportionalitätsfaktor ist etwa um einen Faktor 7 größer als der von Jackson *et al.* [45] für a-Si bestimmte Wert von $7.9 \cdot 10^{15}$ und nahezu identisch mit dem von Klein *et al.* [110] für mikrokristallines Silizium ermittelten Wert von

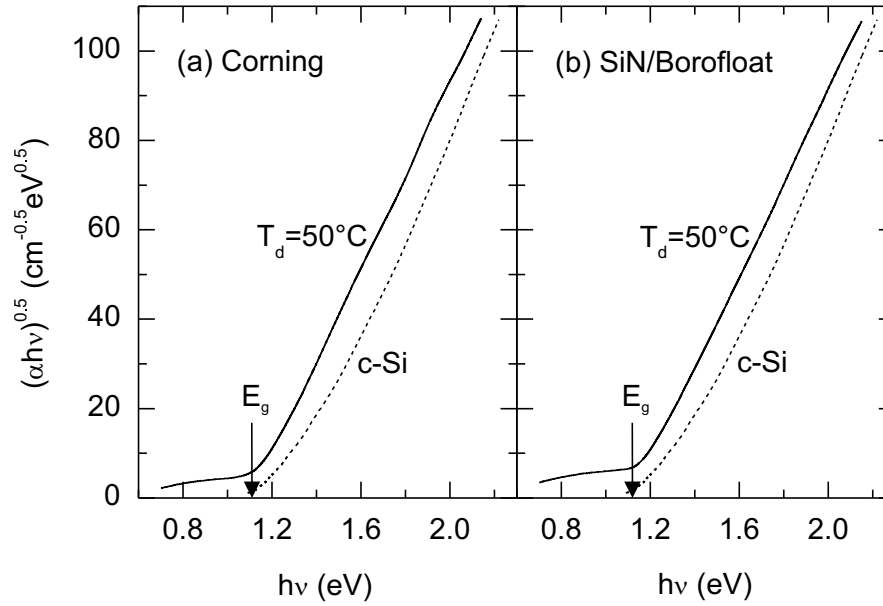


Abbildung 3.28: Tauc-Plot $((\alpha h\nu)^{0.5}$ gegen $h\nu$) für festphasenkristallisiertes poly-Si, abgeschieden bei einer Depositionstemperatur von $T_d = 50^\circ\text{C}$ auf (a) Corning Glas und (b) SiN-beschichtetem Borofloat Glas. Zum Vergleich sind die Absorptionsdaten von c-Si [105] ebenfalls als Tauc-Plot dargestellt (gestrichelte Linie).

$3.6 \cdot 10^{16}$. Mit Hilfe der Relation 3.13 kann die Spindichte festphasenkristallisierter poly-Si Schichten aus optischen Absorptionsmessungen bestimmt werden. Auf diese Weise ist auch eine Abschätzung der Defektdichten auf „ESR-untauglichen“ Substraten wie SiN- oder ZnO-beschichtetem Glas möglich. Die aus den PDS-Spektren der poly-Si Filme auf SiN/Borofloat Glas bestimmten Flächen A_{PDS} der integralen Defektabsorption sind durch Pfeile an der Achse in Abb. 3.27 gekennzeichnet.

Der Absorptionskoeffizient vieler amorpher und direkter Halbleiter kann für Photonenenergien oberhalb der Absorptionskante durch

$$\alpha(h\nu) = \frac{B_m (h\nu - E_g)^2}{h\nu} \quad (3.14)$$

beschrieben werden [111]. Hierbei ist B_m eine materialspezifische Konstante und E_g die direkte optische Bandlücke. In einer Tauc-Darstellung $((\alpha h\nu)^{0.5}$ gegen $h\nu$) zeigen diese Materialien eine gerade Linie, aus deren Extrapolation zu $(\alpha h\nu)^{0.5} = 0$ die optische Bandlücke E_g bestimmt werden kann. In Abb. 3.28 sind die Absorptionsdaten der bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ abgeschiedenen poly-Si Schichten zusammen mit denen von einkristallinem

Silizium in einem Tauc-Plot dargestellt. Während die Kurve für kristallines Silizium über den gesamten Energiebereich eine deutliche Krümmung aufweist kann das Verhalten von festphasenkristallisiertem poly-Si für Photonenenergien $h\nu > 1.3$ eV eindeutig durch eine Gerade beschrieben werden. Aus der Extrapolation dieser Geraden zu $(\alpha h\nu)^{0.5} = 0$ ergibt sich für die bei $T_d = 50$ °C abgeschiedenen Schichten eine optische Bandlücke von $E_g = (1.11 \pm 0.01)$ eV auf Corning Glas bzw. $E_g = (1.12 \pm 0.01)$ eV auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas. Die Absorptionskoeffizienten der anderen in Abb. 3.26 dargestellten poly-Si Schichten lassen sich ebenfalls gut durch Gleichung 3.14 mit Bandlückenenergien von $1.10 \text{ eV} \leq E_g \leq 1.14 \text{ eV}$ beschreiben. Ein identisches Absorptionsverhalten allerdings mit einer kleineren Bandlückenenergie von $E_g = (0.97 \pm 0.03)$ eV wird auch von Jackson *et al.* bei PDS-Messungen an direkt mittels chemischer Gasphasenabscheidung (LPCVD) deponierten poly-Si Schichten beobachtet [109]. Diese Ergebnisse zeigen, dass die optische Absorption in festphasenkristallisiertem poly-Si von direkten optischen Band-zu-Band Übergängen über die indirekte Bandlücke von kristallinem Silizium dominiert wird.

3.4 Wasserstoffpassivierung

Polykristallines Silizium hat direkt nach der Kristallisation aufgrund seiner hohen Defektkonzentration nur eine geringe elektronische Qualität und findet daher in dieser Form keine Anwendung in der Herstellung elektronischer Bauelemente. Ein bedeutender Defekt in poly-Si ist dabei das Si Dangling-Bond, das insbesondere wegen seiner energetischen Lage in der Bandlückenmitte einen großen Einfluss auf den Ladungstransport hat. Durch eine Wasserstoffpassivierung, bei der das Material atomarem Wasserstoff ausgesetzt wird, kann die Konzentration dieser Dangling-Bond Defekte effektiv um einen Faktor 3 [112] bis 10 [113] reduziert und damit in vielen Fällen die elektrischen Eigenschaften des Materials bzw. entsprechender Bauelemente verbessert werden [114]. Neben der Passivierung von Dangling-Bonds werden durch eine Wasserstoffbehandlung häufig aber auch zusätzliche neue Defekte erzeugt [115, 116], die sich negativ auf die elektronischen Materialeigenschaften auswirken. Im Folgenden wird daher der Einfluss einer Wasserstoffpassivierung auf Defekte und den Ladungstransport in festphasenkristallisierten poly-Si untersucht. Zu diesem Zweck wurden einzelne poly-Si Schichten sukzessive für unterschiedliche Passivierungszeiten t_H einem optisch isolierten Wasserstoffplasma [43] bei einer Substrattemperatur von 350 °C ausgesetzt. Sowohl vor der

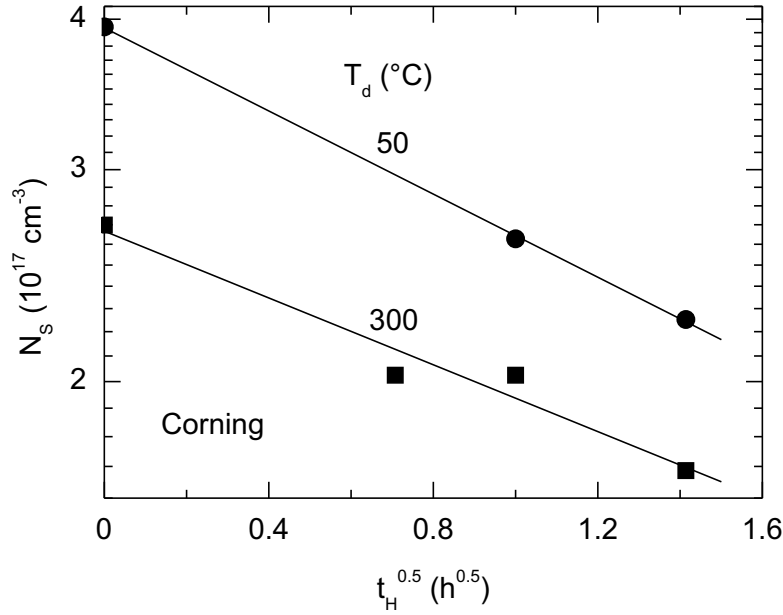


Abbildung 3.29: Spindichte N_S der bei $T_d = 50^\circ C$ und $T_d = 300^\circ C$ auf Corning Glas deponierten und festphasenkristallisierten poly-Si Schichten als Funktion der Wurzel der Passivierungsdauer t_H .

Passivierung als auch nach jedem Passivierungsschritt wurden die poly-Si Schichten mittels ESR-, PDS-, Halleffekt- sowie temperaturabhängiger Dunkelleitfähigkeits- und Photoleitfähigkeitsmessungen charakterisiert.

Abb. 3.29 zeigt die Abnahme der Spindichte als Funktion der Wurzel der Passivierungsdauer t_H für festphasenkristallisiertes poly-Si auf Corning Glas. Nach einer Passivierungsdauer von $t_H^{0.5} \approx 1.4 h^{0.5}$ sinkt die Spindichte von anfänglich $N_S \approx 3.9 \cdot 10^{17} cm^{-3}$ auf $N_S \approx 2.3 \cdot 10^{17} cm^{-3}$ für den bei $T_d = 50^\circ C$ bzw. von $N_S \approx 2.7 \cdot 10^{17} cm^{-3}$ auf $N_S \approx 1.7 \cdot 10^{17} cm^{-3}$ für den bei $T_d = 300^\circ C$ abgeschiedenen poly-Si Film. Für $t_H^{0.5} > 1.4 h^{0.5}$ war eine Bestimmung der Spindichte aufgrund des oben erwähnten Untergrundsignals aus dem Substrat nicht mehr möglich. Im untersuchten Zeitbereich ist die Abnahme der Dangling-Bond Konzentration eindeutig durch eine wurzelförmige Zeitabhängigkeit gegeben (Geraden in Abb. 3.29). Dieses Verhalten ist konsistent mit einer diffusionslimitierten Passivierung von Dangling-Bonds in den untersuchten poly-Si Schichten [10]. Hierbei breitet sich die Wasserstofffront ausgehend von der Oberfläche in das Probenvolumen aus und eliminiert so lange Dangling-Bonds, bis ein Gleichgewichtszustand zwischen Defektpassivierung und Defektgeneration erreicht wird. Geht man davon aus, dass die Spindichte auch für Passivierungszeiten

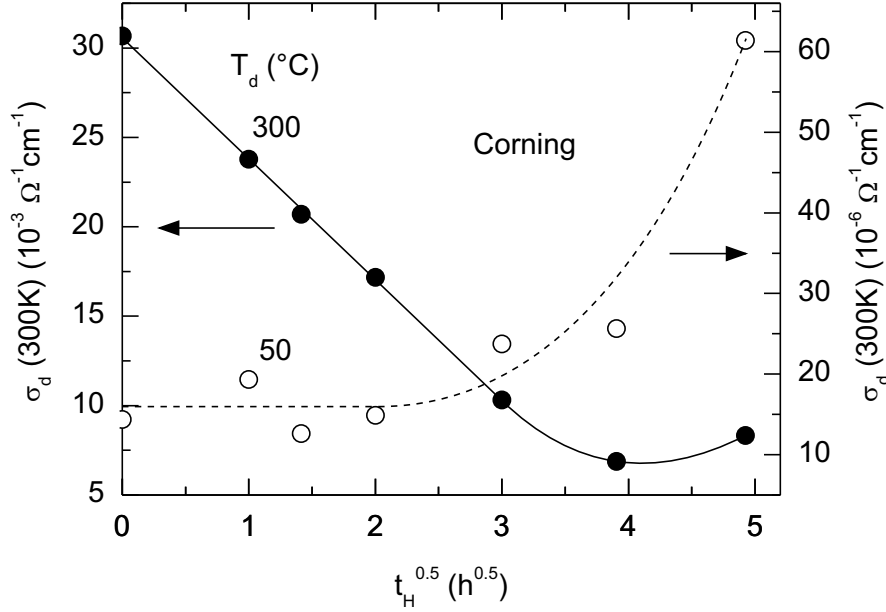


Abbildung 3.30: Dunkelleitfähigkeit σ_d bei $T = 300$ K als Funktion der Wurzel der Wasserstoffpassivierungsdauer t_H für die bei $T_d = 50$ °C und $T_d = 300$ °C auf Corning Glas deponierten poly-Si Schichten.

$t_H^{0.5} > 1.4 \text{ h}^{0.5}$ unvermindert mit $\sqrt{t_H}$ abnimmt, so schneiden sich die extrapolierten Geraden bei $t_H^{0.5} \approx 5 \text{ h}^{0.5}$ und $N_S \approx 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Sehr ähnliche Werte werden für die Sättigung der Spindichte in festphasenkristallisierten bzw. direkt kristallin gewachsenen poly-Si Schichten gefunden [104]. Ausgehend von einem effektiven Diffusionskoeffizienten $D_{\text{eff}} \approx 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{s}$ bei $T = 350$ °C [104] ist eine Passivierungsdauer von $t_H \approx 25$ h zudem konsistent mit der Zeit, die der Wasserstoff zum vollständigen Durchdringen der $d \approx 1 \mu\text{m}$ dicken Si-Schicht benötigt. Die Spindichte in den hier untersuchten festphasenkristallisierten poly-Si Schichten zeigt somit eine für die diffusionslimitierte Absättigung von Dangling-Bonds typische Abnahme mit der Passivierungsdauer.

Wie die nun folgenden Ergebnisse der Transportuntersuchungen zeigen, ist der Einfluss der Wasserstoffpassivierung auf die elektrischen Eigenschaften der hier untersuchten poly-Si Schichten dagegen deutlich komplexer und lässt sich nur teilweise mit der Reduktion von Dangling-Bond Defekten erklären. Abb. 3.30 zeigt die Dunkelleitfähigkeit σ_d bei $T = 300$ K für die bei $T_d = 300$ °C und $T_d = 50$ °C auf Corning Glas deponierten und anschließend festphasenkristallisierten poly-Si Schichten als Funktion der Wurzel der Passivierungsdauer. Zunächst fällt auf, dass die bei unterschiedlichen Depositionstemperaturen abgeschiedenen Schichten ein entgegengesetztes

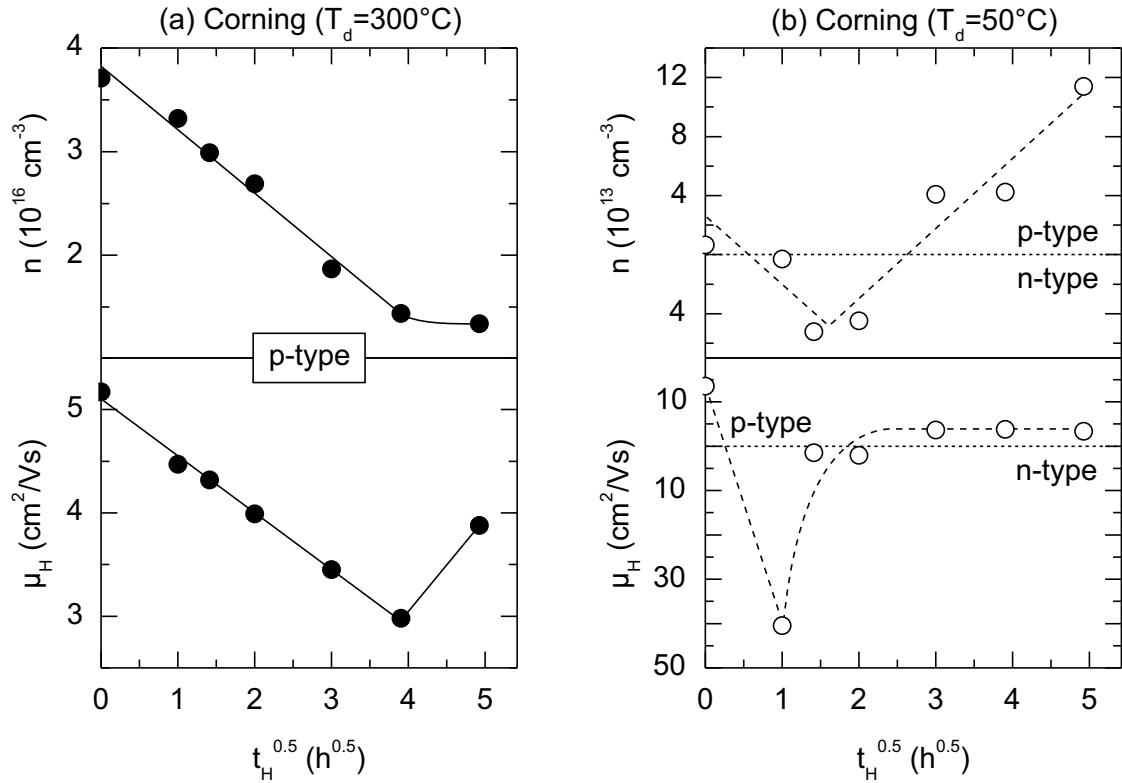


Abbildung 3.31: Ladungsträgerkonzentration n und Hallbeweglichkeit μ_H als Funktion der Wurzel der Passivierungsdauer t_H für festphasenkristallisiertes poly-Si auf Corning Glas, abgeschieden bei (a) $T_d = 300^\circ\text{C}$ und (b) $T_d = 50^\circ\text{C}$.

Passivierungsverhalten zeigen. Für die bei $T_d = 300^\circ\text{C}$ abgeschiedene poly-Si Schicht nimmt σ_d bis zu einer Passivierungsdauer von $t_H^{0.5} \approx 4 \text{ h}^{0.5}$ proportional zu $\sqrt{t_H}$ ab und steigt dann zu längeren Passivierungszeiten wieder leicht an. Wie die zugehörigen Ergebnisse der Halleffektmessungen in Abb. 3.31 (a) zeigen, ist die anfängliche Leitfähigkeitsabnahme auf einen gleichzeitigen Rückgang von n und μ_H zurückzuführen, der ebenfalls durch eine $\sqrt{t_H}$ -Abhängigkeit beschrieben werden kann. Der leichte Anstieg für $t_H^{0.5} > 4 \text{ h}^{0.5}$ ist dagegen eindeutig einer Zunahme der Beweglichkeit zuzuordnen, während die Ladungsträgerkonzentration nahezu konstant bleibt. Im deutlichen Gegensatz dazu bleibt die Dunkelleitfähigkeit der bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ abgeschiedenen poly-Si Schicht zuerst nahezu unverändert und steigt dann für $t_H^{0.5} > 2 \text{ h}^{0.5}$ erkennbar mit fortschreitender Wasserstoffpassivierung an. Ein eindeutiger funktionaler Zusammenhang wie für die bei $T_d = 300^\circ\text{C}$ deponierte Schicht ist dabei nicht zu erkennen. Die entsprechenden Hallergebnisse in Abb. 3.31 (b) zeigen, dass die Löcherkonzentration mit

zunehmender Passivierungsdauer proportional zu $\sqrt{t_H}$ zunächst abfällt und dann für $t_H^{0.5} > 2 \text{ h}^{0.5}$ wieder ansteigt. Die anfängliche Abnahme der Löcherkonzentration führt dabei aufgrund der insgesamt sehr geringen absoluten Dichte freier Ladungsträger im Bereich $1 \text{ h}^{0.5} \leq t_H^{0.5} \leq 2 \text{ h}^{0.5}$ zu einem vorübergehenden Übergang von p- zu n-Leitung. Die Hallbeweglichkeit steigt bei diesem Wechsel des Leitungstyps erst abrupt von $\mu_H \approx 15 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ um etwa einen Faktor 4 an und geht dann mit weiterer Passivierung wieder auf einen für $t_H^{0.5} \geq 3 \text{ h}^{0.5}$ konstanten Wert von $\mu_H \approx 5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ zurück. Die für festphasenkristallisierte poly-Si Schichten auf Corning Glas beobachtete Abnahme der Löcherkonzentration zu Beginn der Passivierung verdeutlicht, dass der Wasserstoff nicht nur Defekte passiviert, sondern auch aktive Akzeptoren entweder neutralisiert oder durch Bildung zusätzlicher donatorartiger Zustände kompensiert. Dieser Effekt wird grundsätzlich in allen untersuchten poly-Si Schichten auf Corning Glas beobachtet. Allerdings unterscheiden sich die bei unterschiedlichen Depositionstemperaturen abgeschiedenen Schichten deutlich sowohl hinsichtlich des absoluten Rückgangs der Ladungsträgerkonzentration ($\Delta n \approx 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ zu $\Delta n \approx 7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$) als auch bezüglich des Passivierungszeitintervalls, in dem diese Abnahme von n beobachtet wird ($t_H^{0.5} \approx 4 \text{ h}^{0.5}$ zu $t_H^{0.5} \approx 1.5 \text{ h}^{0.5}$).

Neben der Depositionstemperatur hat auch das verwendete Substrat einen bemerkenswerten Einfluss auf das Passivierungsverhalten der elektrischen Transporteigenschaften festphasenkristallisierter poly-Si Filme. Abb. 3.32 zeigt σ_d als Funktion von $\sqrt{t_H}$ für die entsprechenden poly-Si Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas. Im deutlichen Gegensatz zu der Schicht auf Corning Substrat steigt die Leitfähigkeit des bei $T_d = 300^\circ\text{C}$ auf SiN/Borofloat Glas deponierten poly-Si Films über einen großen Bereich von $0 \text{ h}^{0.5} \leq t_H^{0.5} \leq 4 \text{ h}^{0.5}$ proportional zu $\sqrt{t_H}$ um etwa 2 Größenordnungen an und geht dann für $t_H^{0.5} > 4 \text{ h}^{0.5}$ in eine Sättigung über. Die Dunkelleitfähigkeit der bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ auf SiN/Borofloat Glas abgeschiedenen poly-Si Schicht nimmt zwar zunächst leicht ab, steigt dann für $t_H^{0.5} > 1 \text{ h}^{0.5}$ aber auch in etwa proportional zu $\sqrt{t_H}$ signifikant an und sättigt ebenfalls für $t_H^{0.5} > 4 \text{ h}^{0.5}$. Insgesamt zeigt die Dunkelleitfähigkeit beider Schichten ein sehr ähnliches Passivierungsverhalten. Anhand der Hallergebnisse in Abb. 3.33 wird deutlich, dass der starke Anstieg der Leitfähigkeit in beiden Filmen durch eine Zunahme der freien Ladungsträgerkonzentration um mehr als 3 Größenordnungen verursacht wird. Die Hallbeweglichkeit fällt dagegen nach dem ersten Passivierungsschritt ($t_H^{0.5} = 1 \text{ h}^{0.5}$) abrupt um mehr als eine Größenordnung ab und steigt mit weiter zunehmender Passivierungsdauer dann nur langsam um einen Faktor 3

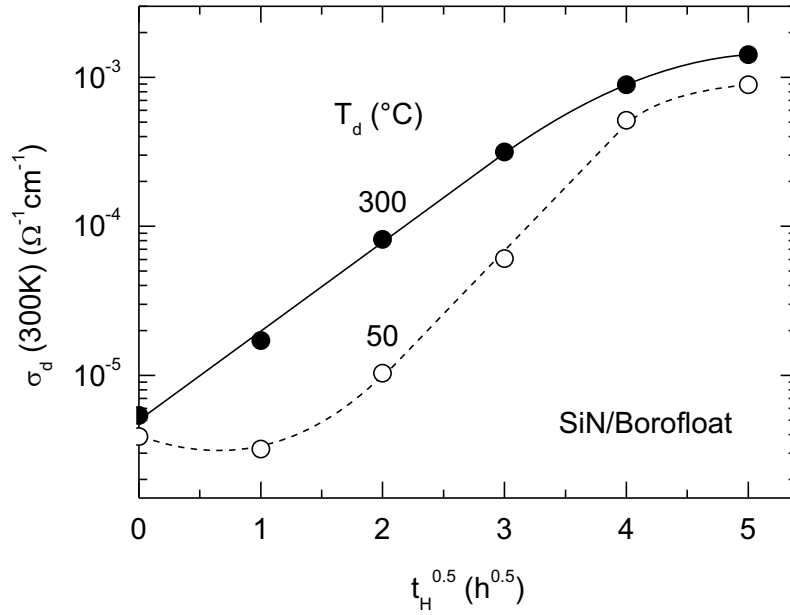


Abbildung 3.32: Dunkelleitfähigkeit σ_d bei $T = 300$ K als Funktion der Wurzel der Wasserstoffpassivierungszeit t_H für die bei $T_d = 50$ °C und $T_d = 300$ °C auf SiN/Borofloat Glas deponierten poly-Si Schichten.

bis 4 wieder an. Analog zu der bei $T_d = 50$ °C auf Corning Glas deponierten Schicht beobachtet man auch für den entsprechenden Film auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas im Bereich $1 h^{0.5} \leq t_H^{0.5} \leq 2 h^{0.5}$ einen Wechsel des Leitungstyps von p- zu n-Leitung. Interessanterweise folgen die Werte der Elektronenkonzentration in diesem Bereich aber ziemlich genau dem Verlauf der Löcherkonzentration. Diese Tatsache könnte darauf hindeuten, dass es sich hierbei nicht um einen tatsächlichen Wechsel des Leitungstyps handelt, sondern dass der Halleffekt nur ein falsches Vorzeichen zeigt. Eine solche Vorzeichenanomalie wird u.a. für a-Si beobachtet [70] und auf den Hopping-Transport über elektronische Zustände in einem Defektband zurückgeführt [117,118]. Inwiefern der Transport in poly-Si Schichten mit sehr geringer Leitfähigkeit (Fermienergie nahe der Bandlückenmitte) tatsächlich über Defektzustände stattfindet und somit eine Vorzeichenanomalie des Halleffektes möglich ist kann an dieser Stelle allerdings nicht eindeutig geklärt werden. Aufgrund der defektbedingten erhöhten Zustandsdichte in der Bandlückenmitte von polykristallinem Silizium [119,120] wäre eine Störbandleitung in solchen Schichten aber durchaus möglich. Abgesehen von dieser besonderen Eigenschaft des bei $T_d = 50$ °C deponierten Films zeigen beide poly-Si Schichten auf SiN/Borofloat Glas aber ein sehr ähnliches Passivierungsverhalten mit nahezu identischen Sättigungswerten

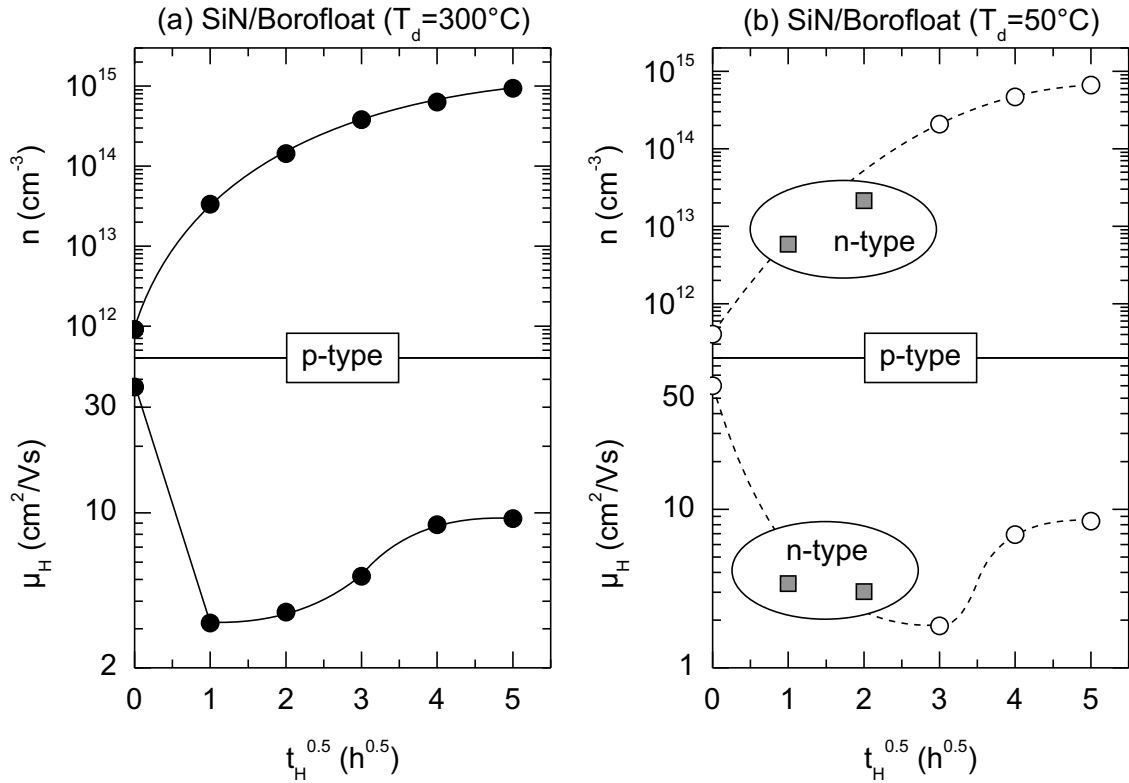


Abbildung 3.33: Ladungsträgerkonzentration n und Hallbeweglichkeit μ_H als Funktion der Wurzel der Passivierungsdauer t_H für festphasenkristallisiertes poly-Si auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas, abgeschieden bei (a) $T_d = 300^\circ\text{C}$ und (b) $T_d = 50^\circ\text{C}$.

der Löcherkonzentration ($n \approx 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) und der Hallbeweglichkeit ($\mu_H \approx 10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$). Die beobachtete Zunahme der Dunkelleitfähigkeit und der Ladungsträgerkonzentration ist typisch für die Wasserstoffbehandlung von poly-Si [104, 121] und konsistent mit der Absättigung offener Si-Bindungen an den Korngrenzen. Eine Abnahme sowohl der Leitfähigkeit als auch der Ladungsträgerkonzentration sowie die Reduktion der Hallbeweglichkeit und der Wechsel des Leitungstyps deuten dagegen stark auf konkurrierende Prozesse wie die Erzeugung zusätzlicher Defekte [115, 122, 123] oder die Neutralisation bzw. Kompensation von Akzeptoren [124, 125] in den festphasenkristallisierten poly-Si Filmen hin.

Um den Einfluss der Wasserstoffpassivierung auf die Transportprozesse genauer zu untersuchen wurde für jeden Passivierungsschritt zusätzlich die Temperaturabhängigkeit der Dunkelleitfähigkeit bestimmt. In Abb. 3.34 ist die Temperaturabhängigkeit von σ_d in Abhängigkeit von der Passivierungszeit t_H für die bei $T_d = 300^\circ\text{C}$ auf Corning Glas

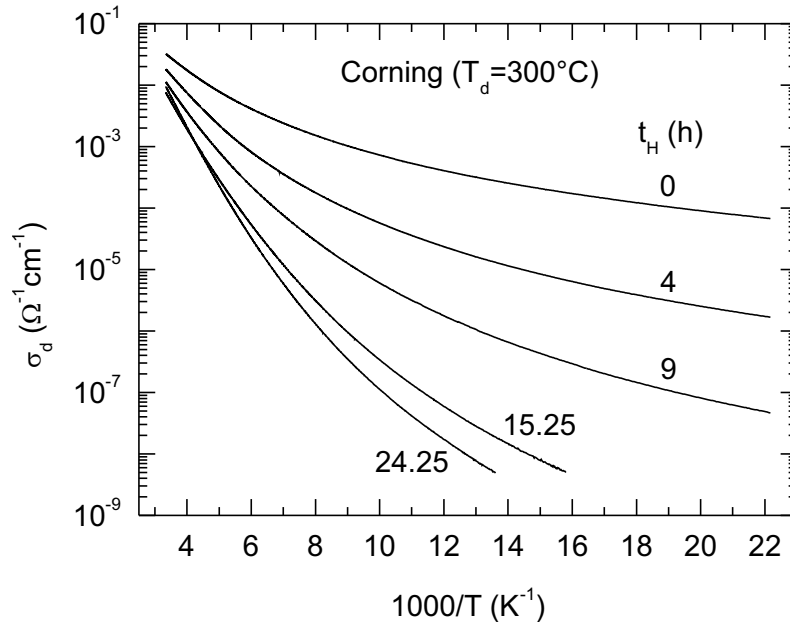


Abbildung 3.34: Dunkelleitfähigkeit σ_d von festphasenkristallisiertem poly-Si auf Corning Glas, abgeschieden bei $T_d = 300$ K, als Funktion der inversen Messtemperatur T^{-1} für unterschiedliche Passivierungsdauern t_H .

abgeschiedene poly-Si Schicht dargestellt. Mit zunehmender Passivierungsdauer nimmt die Krümmung der Kurven bei tiefen Temperaturen deutlich ab. Ferner dehnt sich der Temperaturbereich, in dem σ_d durch ein Arrhenius-Verhalten beschrieben werden kann zu tieferen Temperaturen hin aus und die Steigung der Kurven in diesem Bereich nimmt zu. Ein Vergleich mit Abb. 3.9 zeigt außerdem, dass die Wasserstoffbehandlung einen ähnlichen Einfluss auf das Temperaturverhalten der spezifischen Leitfähigkeit hat wie die Depositionstemperatur des amorphen Ausgangsmaterials. Die Temperaturabhängigkeit von σ_d nach der längsten Passivierungsdauer von $t_H = 15.25$ h entspricht in etwa dem Verlauf der unpassivierten poly-Si Probe, die bei $T_d = 200$ °C abgeschieden wurde. Dieses Ergebnis zeigt, dass der für das Abflachen der temperaturabhängigen Leitfähigkeitskurven verantwortliche Transportprozess durch eine Wasserstoffpassivierung effektiv reduziert wird. Die in Abb. 3.35 dargestellte Temperaturabhängigkeit der Dunkelleitfähigkeit des entsprechenden poly-Si Films auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas zeigt dagegen ein genau entgegengesetztes Passivierungsverhalten. Hier nimmt die Steigung mit der Passivierungsdauer ab und die Kurven weisen zudem eine immer ausgeprägtere Krümmung zu tiefen Temperaturen auf. Durch lineare Regression der Kurven in Abb. 3.34 und Abb. 3.35 im Bereich hoher Temperaturen, in dem ein

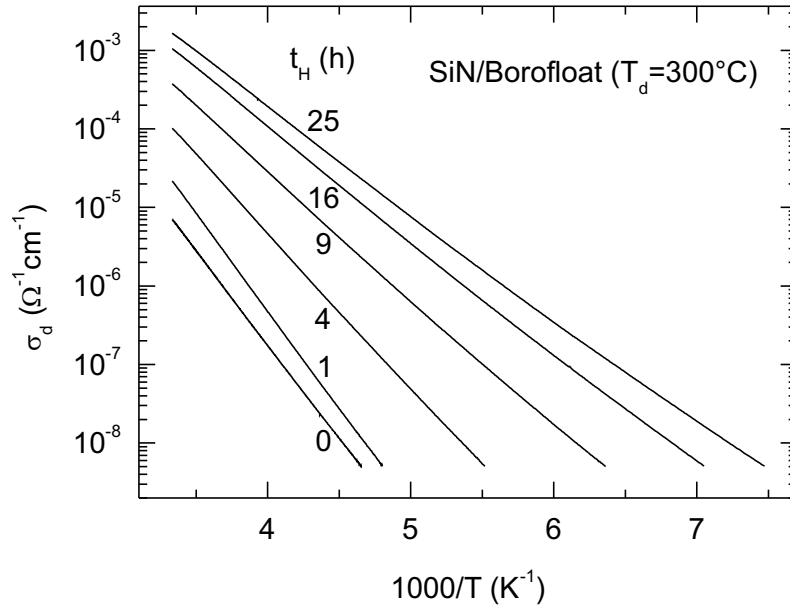


Abbildung 3.35: Dunkelleitfähigkeit σ_d von festphasenkristallisiertem poly-Si auf SiN/Borofloat Glas, abgeschieden bei $T_d = 300$ K, als Funktion der inversen Messtemperatur T^{-1} für unterschiedliche Passivierungsdauern t_H .

eindeutiges Arrhenius-Verhalten vorliegt, kann die Aktivierungsenergie der Leitfähigkeit E_A^σ für unterschiedliche Passivierungszeiten bestimmt werden. Abb. 3.36 zeigt E_A^σ für verschiedene poly-Si Schichten als Funktion der Passivierungsdauer. Während die Aktivierungsenergie des bei $T_d = 300$ °C auf Corning Glas abgeschiedenen Films mit zunehmender Passivierungsdauer ansteigt sinkt E_A^σ für die bei $T_d = 50$ °C auf Corning Glas bzw. für die bei $T_d = 50$ °C und $T_d = 300$ °C auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas deponierten Filme. Die Kurvenverläufe lassen dabei vermuten, dass sich die Aktivierungsenergien aller Schichten zu langen Passivierungszeiten asymptotisch einem gemeinsamen Wert zwischen $E_A^\sigma = 0.2$ eV und $E_A^\sigma = 0.3$ eV annähern (grauer Bereich in Abb. 3.36). Unter der Annahme, dass die Temperaturabhängigkeit von σ_d im Wesentlichen durch die thermische Aktivierung freier Ladungsträger innerhalb der Kristallite bestimmt wird, korreliert E_A^σ mit dem energetischen Abstand zwischen der Fermienergie und der Valenzbandkante in der Mitte des Kornes. Der Verlauf von E_A^σ mit t_H deutet in diesem Fall auf eine wasserstoffinduzierte Verschiebung des Fermi-niveaus von der Valenzbandkante in Richtung Bandlückenmitte (Corning $T_d = 300$ °C) bzw. von der Bandlückenmitte in Richtung Valenzbandkante (Corning $T_d = 50$ °C, SiN/Borofloat $T_d = 50$ °C und $T_d = 300$ °C) hin.

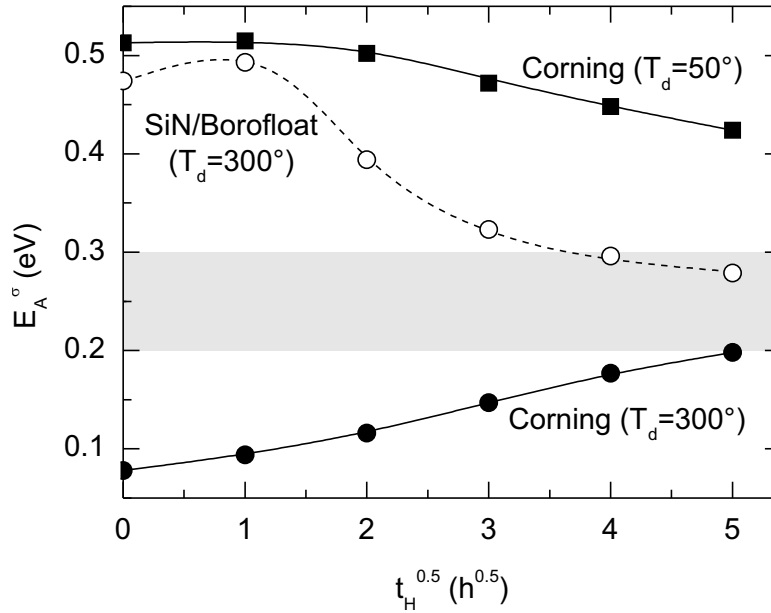


Abbildung 3.36: Aktivierungsenergie der Dunkelleitfähigkeit E_A^σ als Funktion der Wurzel der Passivierungsdauer t_H für festphasenkristallisierte poly-Si Schichten auf Corning Glas und SiN/Borofloat Glas.

Die Änderungen im Transportverhalten mit zunehmender Wasserstoffpassivierung äußern sich auch in den optoelektrischen Eigenschaften der festphasenkristallisierten poly-Si Schichten. Abb. 3.37 zeigt den Photostrom I_{ph} der bei $T_d = 300^\circ C$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Schicht als Funktion von T^{-1} für unterschiedliche Passivierungszeiten t_H . Mit zunehmender Passivierungsdauer nimmt I_{ph} zunächst bis zu $t_H = 15.25$ h nahezu im gesamten Temperaturbereich ab und steigt dann zu $t_H = 24.25$ h insbesondere bei hohen Temperaturen wieder an. Des Weiteren verschiebt sich das Maximum des Photostroms mit t_H zu höheren Temperaturen und die Krümmung der Kurven bei tiefen Temperaturen nimmt deutlich zu. Demgegenüber zeigt die bei der gleichen Depositionstemperatur auf SiN/Borofloat Glas abgeschiedenen poly-Si Schicht (Abb. 3.38) einen sehr deutlichen Anstieg der Photoleitfähigkeit und das Maximum von I_{ph} verschiebt sich mit t_H zu niedrigeren Temperaturen. Das gegensätzliche Passivierungsverhalten von I_{ph} für poly-Si Filme auf Corning Glas und SiN-beschichtetem Borofloat Glas korreliert dabei gut mit der Dunkelleitfähigkeit (Abb. 3.31 und 3.33) sowie der zugehörigen Aktivierungsenergie (Abb. 3.36). Insbesondere der Zusammenhang zwischen I_{ph} und E_A^σ zeigt dabei, dass die Photoleitfähigkeit stark von der Lage des Fermi-niveaus innerhalb des Kristalliten abhängt. Je weiter die

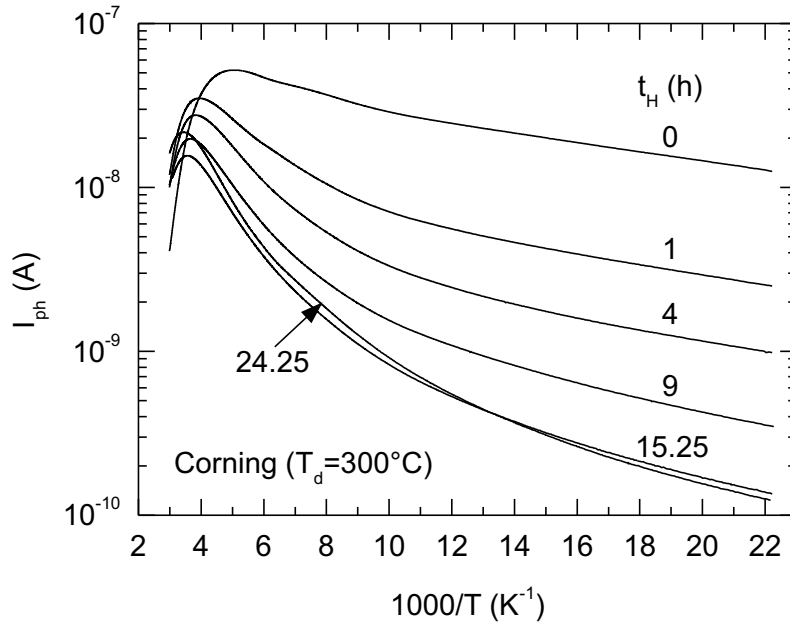


Abbildung 3.37: Photostrom I_{ph} der bei $T_d = 300^\circ C$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Schicht als Funktion der inversen Messtemperatur T^{-1} für unterschiedliche Passivierungsdauern t_H .

Fermienergie in der Bandlückenmitte ($E_g/2$) liegt, desto geringer ist der beobachtete Photostrom. Ein ähnliches Verhalten ist auch für a-Si [126,127] und μc -Si [128] bekannt und lässt vermuten, dass die Verschiebung des Fermi-niveaus aus der Bandlückenmitte heraus eine Besetzung von tiefen Defektzentren mit Majoritätsladungsträgern zur Folge hat, wodurch diese nicht mehr unmittelbar als Rekombinationszentren zur Verfügung stehen. Die starke Zunahme von I_{ph} für den Film auf SiN/Borofloat Glas, der im unpassivierten Zustand eine große Aktivierungsenergie von $E_A^\sigma \approx E_g/2$ besitzt, wäre in diesem Fall konsistent mit einer zur Bandlückenmitte hin ansteigenden Zustandsdichte. Des Weiteren beeinflusst der Wasserstoff natürlich auch direkt die absolute Konzentration rekombinationsaktiver Defekte in den Schichten. In diesem Fall korrespondiert die Zunahme des Photostroms für den poly-Si Film auf SiN/Borofloat mit einer Defektreduktion, wohingegen die Abnahme von I_{ph} für die poly-Si Schicht auf Corning Glas auf eine zusätzliche Generation rekombinationsaktiver Defekte während der Wasserstoffbehandlung schließen lässt.

Die elektrischen und optoelektrischen Eigenschaften von wasserstoffpassivierten poly-Si Filmen deuten an, dass der Wasserstoff in den untersuchten Filmen nicht nur offene Si-Bindungen absättigt, sondern insbesondere auch neue elektrisch aktive Defekte in

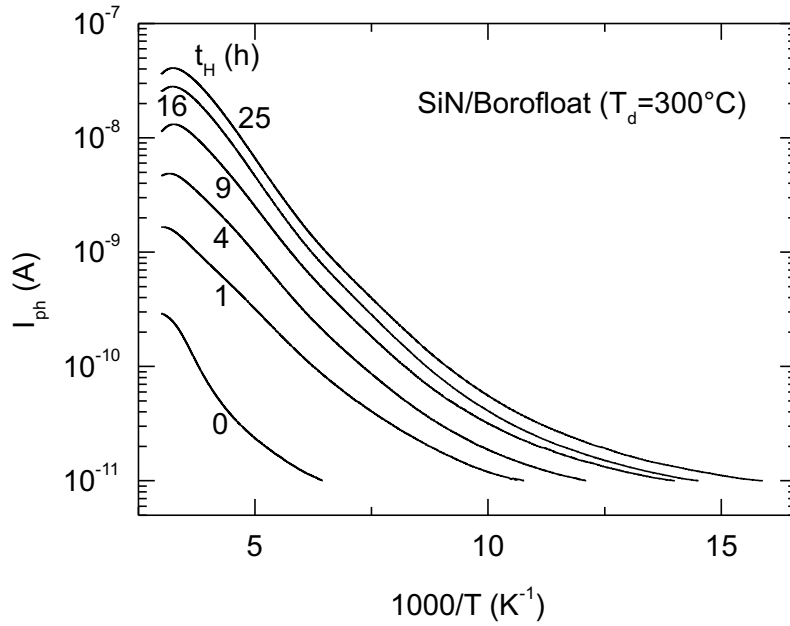


Abbildung 3.38: Photostrom I_{ph} der bei $T_d = 300^\circ C$ auf SiN/Borofloat Glas deponierten poly-Si Schicht als Funktion der inversen Messtemperatur T^{-1} für unterschiedliche Passivierungsdauern t_H .

der Bandlücke erzeugt. Um diese wasserstoffinduzierte Defektgeneration nachzuweisen, wurde die Änderung der optischen Absorption mittels PDS-Messungen untersucht. Abb. 3.39 zeigt α als Funktion der Photonenenergie für poly-Si Schichten auf Corning Glas und SiN/Borofloat Glas vor (durchgezogene Linien) und nach (gestrichelte Linien) einer Wasserstoffpassivierung für $t_H = 25$ h. Für die auf Corning Glas abgeschiedenen Filme steigt die Absorption für $h\nu \leq 1.1$ eV deutlich an. Eine etwas größere Zunahme wird dabei für die bei $T_d = 300^\circ C$ abgeschiedene Probe (Abb. 3.39 (b)) beobachtet, die vor der Passivierung die geringste Absorption für Photonenenergien unterhalb der Bandlückenenergie zeigt. Zusätzlich steigt bei diesem Film nach der Passivierung auch die Absorption im Energiebereich $1.4 \text{ eV} \leq h\nu \leq 2.4 \text{ eV}$ um bis zu $\Delta\alpha \approx 0.8 \text{ cm}^{-1}$ an. Ein völlig anderes Verhalten wird dagegen für die entsprechenden poly-Si Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas beobachtet. Auf diesem Substrat bleibt die Defektabsorption entweder nahezu unverändert ($T_d = 300^\circ C$, Abb. 3.39 (d)) oder sinkt nach der Wasserstoffbehandlung deutlich ab ($T_d = 50^\circ C$, Abb. 3.39 (c)). Die Zunahme der Absorption für Photonenenergien unterhalb der Bandlückenenergie zeigt deutlich, dass in den poly-Si Filmen auf Corning Glas durch die Wasserstoffbehandlung zusätzliche Defekte erzeugt werden. Dieses Ergebnis ist konsistent mit dem Rückgang

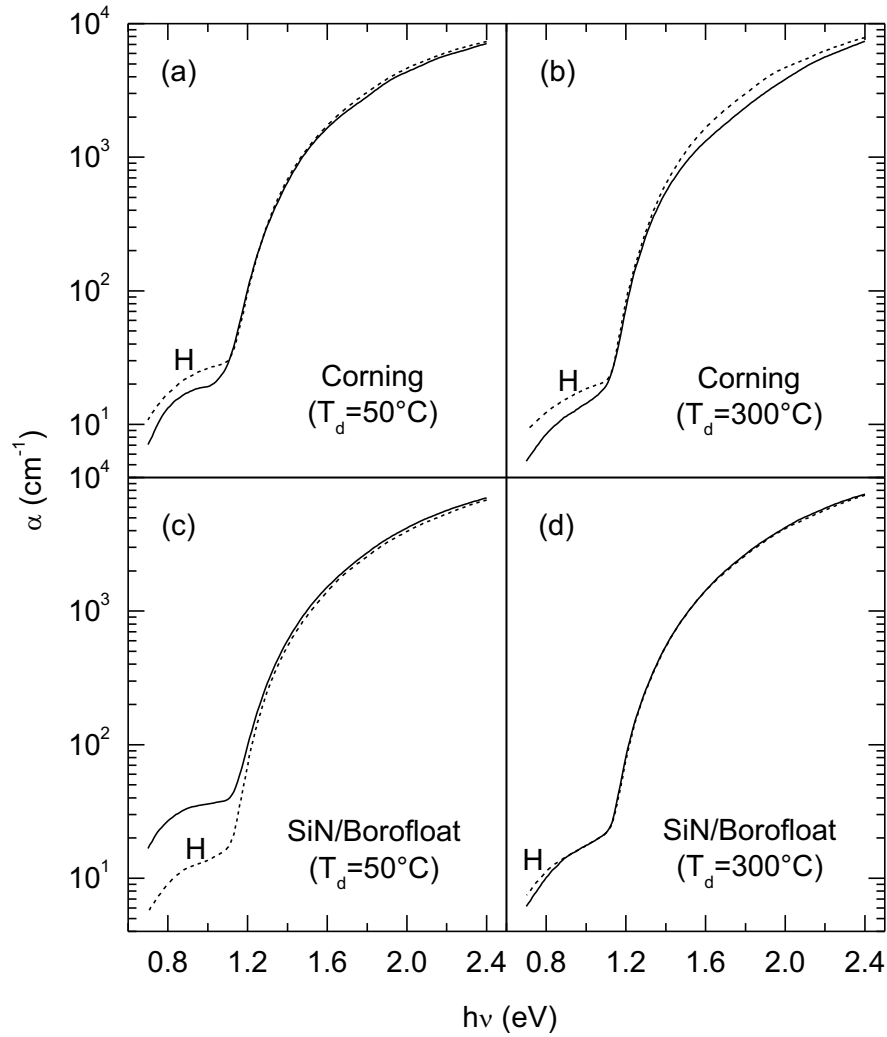


Abbildung 3.39: Absorptionskoeffizient α als Funktion der Photonenenergie $h\nu$ von festphasenkristallisiertem Poly-Si deponiert auf Corning Glas bei (a) $T_d = 50^\circ\text{C}$ und (b) $T_d = 300^\circ\text{C}$ sowie auf SiN/Borofloat Glas bei (c) $T_d = 50^\circ\text{C}$ und (d) $T_d = 300^\circ\text{C}$ vor (durchgezogene Linie) und nach einer Wasserstoffpassivierung für $t_H \approx 25\text{ h}$ (gestrichelte Linie).

der Photoleitfähigkeit in diesen Schichten (Abb. 3.38), steht aber im Widerspruch zur beobachteten Abnahme der Spindichte (Abb. 3.29). Mögliche Ursachen hierfür sind entweder die nicht-paramagnetische Natur der zusätzlich erzeugten Defekte (ESR-inaktiv) oder ein erneuter Anstieg der Spindichte zu langen Passivierungszeiten, für die ESR-Messungen nicht mehr möglich waren. In letzterem Fall müsste die Defektabsorption mit t_H ebenfalls zunächst absinken und erst zu langen Passivierungszeiten ansteigen. Wie die integrale Defektabsorption A_{PDS} als Funktion der Wurzel der Passi-

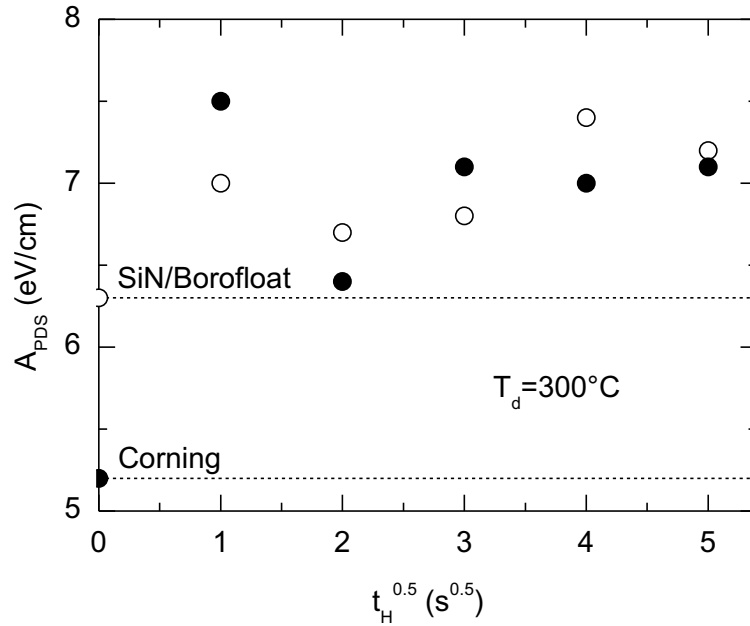


Abbildung 3.40: Integrale Defektabsorption A_{PDS} als Funktion der Wurzel der Passivierungsdauer t_H für festphasenkristallisiertes poly-Si auf Corning Glas und SiN-beschichtetem Borofloat Glas, abgeschieden bei $T_d = 300^\circ\text{C}$.

vierungsdauer t_H in Abb. 3.40 zeigt (ausgefüllte Punkte), wird ein solches Verhalten allerdings nicht beobachtet. Vielmehr führt bereits der erste Passivierungsschritt zu einer deutlichen Zunahme der Defektabsorption, die sich mit weiter zunehmender Passivierungsdauer dann nur noch geringfügig ändert. Bei den wasserstoffinduzierten Defekten handelt es sich somit nicht um einfach besetzte Silizium Dangling-Bonds. Die deutlich geringere Defektabsorption nach der Wasserstoffpassivierung für die bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ auf SiN/Borofloat abgeschiedenen poly-Si Schichten ist dagegen konsistent mit einer Defektpassivierung. Die Beobachtung, dass sich A_{PDS} für die bei $T_d = 300^\circ\text{C}$ auf SiN/Borofloat Glas abgeschiedene poly-Si Schicht (offene Punkte in Abb. 3.40) mit der Passivierung so gut wie nicht ändert, widerspricht dagegen der starken Zunahme des Photostroms (Abb. 3.38) und bekräftigt die Annahme, dass im wesentlichen die Verschiebung der Fermienergie aus der Bandlückenmitte heraus für den Anstieg des Photostroms verantwortlich sein könnte. Anhand der PDS-Daten wurde zusätzlich der Einfluss der Passivierung auf die optische Bandlücke der festphasenkristallisierten poly-Si Schichten untersucht. Auch nach der Passivierung lässt sich das Absorptionsverhalten der Schichten gut durch Gleichung 3.14 beschreiben. Die dabei ermittelten Werte für die optischen Bandlücken der in Abb. 3.39 dargestellten poly-Si Schichten betragen

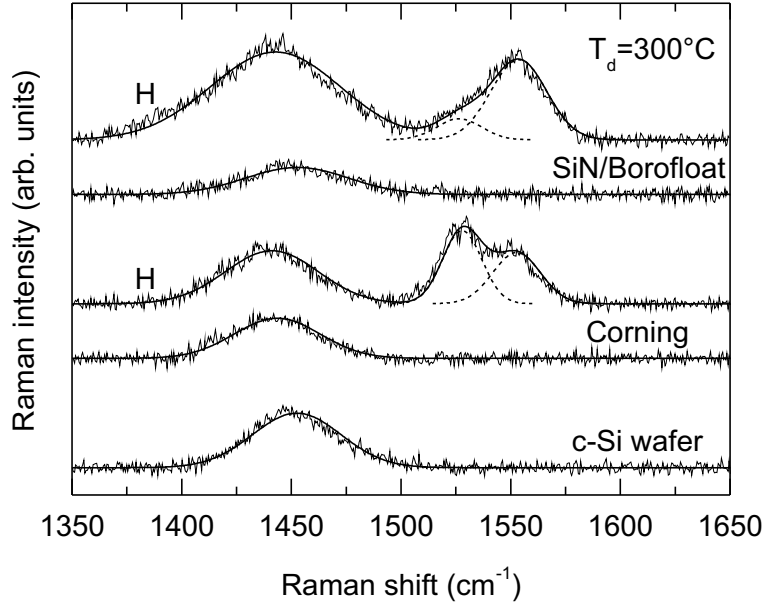


Abbildung 3.41: Ramanspektren von festphasenkristallisiertem poly-Si auf Corning Glas und SiN/Borofloat Glas, abgeschieden bei $T_d = 300\text{ °C}$, vor und nach (Beschriftung H) einer Wasserstoffpassivierung mit Deuterium für $t_H = 25\text{ h}$. Zum Vergleich ist das Spektrum eines unbehandelten c-Si Wafers angegeben. Alle Spektren sind untergrundkorrigiert und entlang der Intensitätsachse verschoben.

$E_g \approx (1.11 \pm 0.02)\text{ eV}$. Im Gegensatz zu der von Jackson *et al.* [109] für LPCVD poly-Si beobachteten leichten Vergrößerung der Bandlücke von $E_g = (0.97 \pm 0.03)\text{ eV}$ auf $E_g = (1.02 \pm 0.01)\text{ eV}$ nach einer Passivierungsdauer von $t_H = 2\text{ h}$ hat die Passivierung anscheinend keinen Einfluss auf die optische Bandlücke der hier untersuchten festphasenkristallisierten poly-Si Schichten.

Weitergehende mikroskopische Informationen über die Bindungskonfiguration von Wasserstoff in poly-Si können mittels Ramanspektroskopie gewonnen werden. Abb. 3.41 zeigt Ramanspektren von festphasenkristallisierten poly-Si Filmen auf Corning Glas und auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas, abgeschieden bei $T_d = 300\text{ °C}$, sowohl vor als auch nach einer Wasserstoffpassivierung für $t_H = 25\text{ h}$. Die Passivierung der Schichten erfolgte mit Deuterium (D) und die Spektren wurden nachträglich bezüglich des Untergrundsignals korrigiert. Zur besseren Identifikation der durch die Wasserstoffbehandlung bedingten lokalen Schwingungsmoden ist zudem das Spektrum von unpassiviertem c-Si dargestellt. Die Ramanspektren der unbehandelten poly-Si Schichten zeigen eine Bande bei $\nu \approx 1440\text{ cm}^{-1}$ (Corning Glas) bzw. $\nu \approx 1450\text{ cm}^{-1}$

(SiN/Borofloat Glas). Eine entsprechende Ramanlinie wird auch für c-Si beobachtet ($\nu \approx 1450 \text{ cm}^{-1}$) und kann der 3. Ordnung der TO-Phononenmode zugeordnet werden [129, 130]. Nach der Wasserstoffbehandlung schiebt diese Bande um etwa 5 cm^{-1} (Corning Glas) bzw. 10 cm^{-1} (SiN/Borofloat Glas) zu kleineren Frequenzen und ihre Intensität nimmt (insbesondere für die auf SiN/Borofloat Glas deponierte poly-Si Schicht) zu. Dieses Verhalten deutet entweder darauf hin, dass sich die Phononeneigenschaften durch die Passivierung ändern oder dass sich im Bereich der TO-Mode 3. Ordnung auch eine wasserstoffbedingte lokale Schwingungsmode befindet. Zusätzlich treten nach der Wasserstoffbehandlung zwei weitere Ramanlinien bei $\nu \approx 1530 \text{ cm}^{-1}$ und $\nu \approx 1550 \text{ cm}^{-1}$ in den Spektren auf. Die relative Intensität dieser zwei Moden zueinander ist dabei für die beiden Substrate stark unterschiedlich. Auf Corning Glas haben beide Moden eine ähnliche Intensität, wohingegen auf SiN/Borofloat Glas die höherfrequente Mode dominiert. Die wasserstoffbedingte Ramanbande im Bereich um $\nu \approx 1450 \text{ cm}^{-1}$ kann der Streckschwingung isolierter Si-D Bindungen zugeschrieben werden, wohingegen die Linien bei $\nu \approx 1530 \text{ cm}^{-1}$ und $\nu \approx 1550 \text{ cm}^{-1}$ ihren Ursprung vermutlich in zusammenhängenden (Si-D)_x-Komplexen haben [122, 125, 131, 132]. Die Ergebnisse der Ramanuntersuchungen bestätigen zum Einen die Bildung von Si-H Bindungen, d.h. die Passivierung von Dangling-Bonds und zum Anderen die Erzeugung neuer Defekte in Form zusammenhängender (Si-D)_x-Komplexe. Die Bildung dieser auch als Platelets bekannten Defektstrukturen [122, 133] sowie ihr Einfluss auf die elektronischen Eigenschaften wird in Kapitel 4.2.6 genauer diskutiert. Bemerkenswert ist ferner, dass das Substrat offensichtlich einen entscheidenden Einfluss auf die Bindungskonfiguration der Wasserstoffatome in den poly-Si Schichten hat. Für den poly-Si Film auf SiN/Borofloat Glas führt die Wasserstoffbehandlung zu einer Zunahme sowohl der Si-D als auch der (Si-D)_x-Bande, wohingegen der poly-Si Film auf Corning Glas im Wesentlichen nur eine Zunahme der (Si-D)_x-Bande zeigt. Das Verhältnis von passivierten Dangling-Bonds zu zusätzlich erzeugten Defekten ist somit für poly-Si Filme auf SiN/Borofloat Glas deutlich größer als für entsprechende Filme auf Corning Glas. Diese Beobachtung ist konsistent mit der passivierungsbedingten Zu- bzw. Abnahme der Photoleitfähigkeit in diesen poly-Si Schichten. Eine weiterführende Diskussion möglicher Ursachen für den Einfluss des Substrats findet in Kapitel 4.2.7 statt.

4 Diskussion

Die Ergebnisse der strukturellen Untersuchungen an festphasenkristallisierten poly-Si Schichten zeigen, dass es während der Festphasenkristallisation zu einer tensilen Verspannung der Schichten kommt, die von der Grenzfläche zwischen der Si-Schicht und dem Substrat ausgeht. Mit zunehmendem Abstand von der Grenzfläche wird der Stress dabei abhängig vom verwendeten Substrat entweder vollständig (SiN/Borofloat Glas) oder nur teilweise (Corning Glas) abgebaut. In Kapitel 4.1 werden mögliche Ursachen der Verspannungen erörtert und ihr Einfluss sowohl auf den Kristallisationsprozess als auch auf die strukturellen und elektronischen Eigenschaften der resultierenden poly-Si Filme diskutiert. Im zweiten Teil der Diskussion in Kapitel 4.2 liegt der Fokus dann auf den elektrischen Transporteigenschaften der festphasenkristallisierten poly-Si Filme. Die experimentellen Ergebnisse zeigen hier, dass sowohl das Substrat als auch die Depositionstemperatur des amorphen Ausgangsmaterials einen entscheidenden Einfluss auf die elektrischen Eigenschaften der poly-Si Schichten haben. In Abschnitt 4.2.1 wird das elektrische Verhalten der poly-Si Filme mit einem für polykristalline Halbleiter typischen Ladungstransport über Potentialbarrieren an den Korngrenzen beschrieben. Hierbei wird sowohl die energetische Lage als auch die Konzentration der Korngrenzendefekte bestimmt. Die für diese Auswertung notwendige korrekte Interpretation von Halleffektmessungen an polykristallinem Material mit Hilfe sogenannter 2-Phasen Modelle ist Gegenstand von Abschnitt 4.2.2. Im Gegensatz zum Verhalten bei hohen Temperaturen lässt sich das Transportverhalten der poly-Si Schichten im Tieftemperaturbereich nicht mehr mit einem aktivierten Transport über Korngrenzenbarrieren beschreiben. Mögliche Ursachen für diese Abweichung sowie die zugrunde liegenden physikalischen Prozesse sind wesentlicher Bestandteil der Diskussion in den drei folgenden Abschnitten. Der Einfluss von Wasserstoff auf die elektrischen Eigenschaften von poly-Si ist dann Gegenstand der Diskussion in Abschnitt 4.2.6. Hierbei wird insbesondere gezeigt, wie vielfältig und damit komplex die Wechselwirkung von Wasserstoff in poly-Si ist. Im letzten Abschnitt werden schließlich mögliche Ursachen für den großen Einfluss des Substrats auf die Transporteigenschaften diskutiert.

4.1 Strukturelle Verspannungen

Dünne Si-Schichten auf Fremdsubstraten weisen häufig ein großes Maß an struktureller Verspannung auf, die sich wesentlich auf die Eigenschaften der Schichten sowie der aus ihnen hergestellten Bauelemente auswirkt [134, 135]. Im Folgenden werden mögliche Mechanismen für Stress in den hier untersuchten poly-Si Schichten diskutiert und mit den Eigenschaften des Substratmaterials sowie den Präparationsbedingungen korreliert.

Verspannungen in Filmen auf Fremdsubstraten sind entweder eine direkte Folge der Deposition (sogenannter intrinsischer oder wachstumsbedingter Stress) oder werden erst nach der Deposition durch äußere Einflüsse hervorgerufen (sogenannter extrinsischer Stress). Hauptursache für intrinsischen Stress ist die Anordnung der Atome in der abgeschiedenen Schicht, die während bzw. direkt nach der Deposition nicht der energetisch günstigsten Konfiguration entspricht. Ein gegenüber der Gleichgewichtskonfiguration verringerter Atomabstand führt dabei zu kompressiven und ein vergrößerter Abstand zu tensilen Verspannungen. Der intrinsische Stress hängt üblicherweise stark von den Wachstumsparametern der Schicht (z.B. Substrattemperatur, Druck, Depositionsenergie, usw.) ab und kann sich zudem durch nachträgliches Tempern und die damit verbundene Umordnung von Atomen ändern [136]. Da diese Form der Verspannung häufig nur in Kombination mit anderen Mechanismen auftritt, ist eine eindeutige Bestimmung meist sehr schwierig.

Im Gegensatz zu den gerade beschriebenen intrinsischen Verspannungen treten extrinsische Verspannungen erst nach der Deposition auf. Die wichtigsten Ursachen für extrinsischen Stress sind 1) Unterschiede in den thermischen Eigenschaften von Schicht und Substrat, 2) strukturelle Veränderungen in der Schicht und 3) extrinsische Verunreinigungen durch Fremdatome. Im Folgenden werden alle drei Mechanismen genauer erläutert.

4.1.1 Unterschiede in den thermischen Eigenschaften

Thermischer Stress wird durch die unterschiedliche thermische Ausdehnung von Schicht und Substrat bei Temperaturänderungen hervorgerufen. Da Si-Schichten gewöhnlich bei Temperaturen deutlich über Raumtemperatur abgeschieden bzw. kristallisiert werden ist diese Art der Verspannungen auf nahezu jedem Fremdsubstrat vorhanden. Quantitativ lässt sich die thermische Verspannung σ_{th} über die Differenz der linearen

Material	E_Y (GPa)	ν	α_{th} (10^{-6} K^{-1})	σ_{th} (GPa)	σ_{exp} (GPa)
Si	168	0.22	3.8	-	-
PECVD-SiN _x	-	-	3.2	0.07	0.75
Corning 1737F Glas	-	-	3.7	0.01	0.80
Schott Borofloat [®] 33 Glas	-	-	3.3	0.06	-

Tabelle 4.1: Elastizitätsmodul E_Y , Poisson-Verhältnis ν und linearer Ausdehnungskoeffizient α_{th} von Si [138–141], PECVD-SiN_x [142, 143], Corning Glas [40] und Borofloat Glas [42] bei $T = 300 \text{ °C}$ sowie der sich daraus nach Gleichung 4.1 mit $\Delta T = 570 \text{ K}$ ergebende thermische Stress σ_{th} . Zum Vergleich ist der experimentell aus Ramanmessungen bestimmte Stress σ_{exp} angegeben.

Ausdehnungskoeffizienten von Film (α_f) und Substrat (α_s) gemäß

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{th}} &= \frac{E_Y}{1 - \nu} \int_{T_m}^{T_c} [\alpha_f(T) - \alpha_s(T)] dT \\ &\approx \frac{E_Y}{1 - \nu} (\alpha_f - \alpha_s) \Delta T\end{aligned}\tag{4.1}$$

bestimmen [134, 137]. Hierbei ist E_Y das Elastizitätsmodul (Youngsches Modul) und ν das Poisson-Verhältnis des Schichtmaterials und ΔT ist die Temperaturdifferenz zwischen der Kristallisationstemperatur T_c (hier 600 °C bzw. 873 K) und der Messtemperatur T_m , bei der die Stressmessung durchgeführt wurde (hier 300 K). In Tabelle 4.1 sind die thermischen Ausdehnungskoeffizienten der in den hier untersuchten Proben enthaltenen Materialien und der sich daraus gemäß Gleichung 4.1 ergebende thermische Stress σ_{th} angegeben. Zum Vergleich enthält die Tabelle zusätzlich die experimentell mittels Ramanmessungen bestimmte Verspannung σ_{exp} der poly-Si Schichten auf Corning Glas bzw. SiN/Borofloat Glas. Wie man deutlich erkennt, liegen die thermischen Ausdehnungskoeffizienten aller Materialien sehr dicht beieinander und folglich ist auch der gemäß Gleichung 4.1 berechnete thermische Stress relativ gering. Die experimentell beobachtete deutlich größere Verspannung in den poly-Si Filmen kann demnach nicht ausschließlich auf die unterschiedliche thermische Ausdehnung von Schicht und Substrat zurückgeführt werden.

4.1.2 Strukturelle Veränderungen in der Schicht

Eine weitere Ursache für Stress in dünnen Schichten auf Fremdsubstraten können strukturelle Veränderungen im Schichtmaterial sein, die eine Modifikation des Schichtvolumens zur Folge haben. Solche Veränderungen werden entweder durch thermische Behandlung oder durch Wechselwirkung des Materials mit der Umgebung hervorgerufen und führen im Fall einer Volumenvergrößerung zu kompressivem und bei einer Volumenverkleinerung zu tensilem Stress. Typische Mechanismen für eine Wechselwirkung mit der Umgebung sind z.B. die Oxidation bzw. die Nitration.

Neben der Bildung von Oxiden bzw. Nitriden an den Grenzflächen kann insbesondere der Kristallisationsprozess, bei dem der Si-Film von einem ungeordneten amorphen Zustand in einen geordneten polykristallinen Zustand übergeht, als ein solcher Prozess angesehen werden. Untersuchungen zeigen dabei, dass der Übergang von a-Si zu poly-Si mit einer relativen Volumenabnahme von $\Delta V/V \approx 10^{-7}$ einhergeht [144]. Unter der Annahme einer isotropen Volumenverkleinerung folgt daraus eine relative Längenänderung in einer Richtung parallel zum Substrat von $\Delta l/l \approx 0.5\%$ und es ergibt sich gemäß [145, 146]

$$\sigma_{\text{cryst}} = \frac{E_Y}{1 - \nu} \frac{\Delta l}{l} \quad (4.2)$$

ein durch die Kristallisation bedingter tensiler Stress von $\sigma_{\text{cryst}} \approx 1$ GPa. Dieser Wert stimmt gut mit den in dieser Arbeit ermittelten experimentellen Stresswerten für festphasenkristallisierte poly-Si Filme sowohl auf Corning Glas als auch auf SiN/Borofloat Glas überein. Eine zusätzliche Bestätigung für kristallisationsbedingte Verspannungen liefert die Tatsache, dass der Stress zur Grenzfläche hin sowohl auf Corning Glas als auch auf SiN/Borofloat Glas nahezu identisch zunimmt und somit offensichtlich nicht von den thermischen Eigenschaften des Substrats abhängt.

Die zur Substratgrenzfläche hin zunehmende Verspannung in festphasenkristallisierten poly-Si Filmen auf Corning Glas und auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas ist also im Wesentlichen keine Folge der unterschiedlichen thermischen Ausdehnung von Schicht und Substrat, sondern wird durch die Volumenänderung des Si-Films während der Festphasenkristallisation verursacht. Mögliche Ursachen hierfür sind entweder eine Abnahme der Wasserstoffkonzentration oder eine Änderung der Bindungswinkel während der Kristallisation [144].

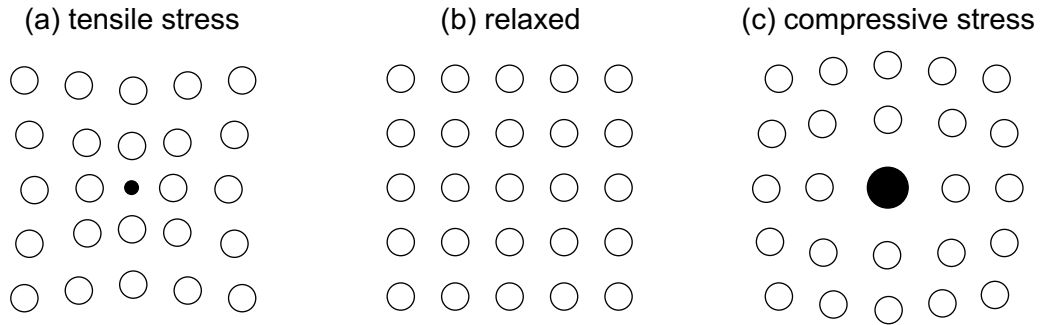


Abbildung 4.1: Gitterverspannung durch substitutionellen Einbau von Fremdatomen (ausgefüllter Punkt) mit im Verhältnis zum kovalenten Radius der Atome des Wirtskristalls (offene Punkte) (a) kleinerem und (c) größerem Atomradius. (b) Ideale Gitterstruktur ohne Verzerrung durch Fremdatome.

4.1.3 Extrinsische Verunreinigung durch Fremdatome

Bei beiden zuvor vorgestellten Stressmechanismen geht die Verspannung von der Grenzfläche zwischen der Si-Schicht und dem Substrat aus. Durch Relaxationsprozesse in der Si-Schicht wird der Stress dabei mit zunehmendem Abstand von der Grenzfläche abgebaut und sollte somit an der Oberfläche dicker poly-Si Filme nicht mehr vorhanden sein. Ein solches Verhalten zeigen von den hier untersuchten Proben allerdings nur die poly-Si Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas. In poly-Si Schichten auf Corning Glas nimmt der tensile Stress mit zunehmendem Abstand von der Grenzfläche zwar ebenfalls ab, wird aber in der etwa 1 μm dicken Schicht nicht vollständig abgebaut. Ein solches Verhalten lässt auf einen zusätzlichen Verspannungsmechanismus schließen, der homogen in der gesamten Schicht wirkt. Eine mögliche Ursache hierfür sind extrinsische Verunreinigungen, die entweder während des Schichtwachstums in den Film eingebaut werden oder während der anschließenden Festphasenkristallisation aus dem Glassubstrat in die Schicht diffundieren. Die Stärke der hierdurch verursachten Verspannung hängt dabei sowohl vom Atomradius der Fremdatome als auch von ihrer Position im Wirtsgitter (substitutionell oder interstitiell) ab. Im Fall des substitutionellen Einbaus ist die relative Änderung der Gitterkonstanten $\Delta a/a$ gemäß der Vegardschen Regel proportional zur Verunreinigungskonzentration N_{imp} und kann durch

$$\frac{\Delta a}{a} = \beta N_{\text{imp}} \quad (4.3)$$

Element	Si	H	O	N	C	B	Ca	Al
a (Å)	1.11	0.31	0.66	0.71	0.76	0.84	1.76	1.21
$\beta(10^{-24} \text{ cm}^3)$		14.41	8.11	7.21	6.31	4.87	-11.71	-1.80
σ_{imp} (GPa)		0.31	0.18	0.16	0.14	0.11	-0.25	-0.04

Tabelle 4.2: Kovalente Atomradien a , Gitterkontraktionsfaktoren β und der sich bei einer Verunreinigungskonzentration von $N_{\text{imp}} = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ daraus ergebende Stress σ_{imp} für mögliche Verunreinigungen in Si. Positive Werte von σ_{imp} entsprechen tensiler und negative Werte kompressiver Verspannung.

beschrieben werden [147, 148]. Die Proportionalitätskonstante β wird als Gitterkontraktionsfaktor bezeichnet und ist proportional zur Differenz der kovalenten Atomradien von Si ($r_{\text{Si}} = 1.11 \text{ Å}$) und eingebautem Fremdatom r_{imp} [149, 150]:

$$\beta = \left(\frac{r_{\text{Si}} - r_{\text{imp}}}{r_{\text{Si}}} \right) N^{-1} \quad (4.4)$$

Hierbei ist $N = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ die Atomdichte von Silizium. Tabelle 4.2 gibt einen Überblick über die Atomradien [151] und die Gitterkontraktionsfaktoren einiger für Si typischer bzw. im Corning Glas enthaltenen [152] Verunreinigungen. Mit Hilfe von Gleichung 4.3 und 4.2 lässt sich die durch Fremdatome bedingte Verspannung σ_{imp} als Funktion der Verunreinigungskonzentration berechnen (Abb. 4.2). In Tabelle 4.2 ist σ_{imp} exemplarisch für eine Defektkonzentration von $N_{\text{imp}} = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ angegeben. Für Atome mit im Vergleich zu Silizium kleinerem Atomradius ist die Verspannung dabei tensil (σ_{imp} positiv), wohingegen Atome mit größerem Radius zu kompressiver Verspannung führen (σ_{imp} negativ). Wie man in Abb. 4.2 deutlich erkennt, findet eine nennenswerte Verspannung der Si-Schicht erst bei einer sehr hohen Konzentration substitutioneller Fremdatome ($> 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) statt. Diese Tatsache wird auch experimentell z.B. für Bor [150] bzw. Phosphor [149] in c-Si beobachtet. Um die zusätzlich auf Corning Glas beobachtete homogene tensile Verspannung von $\sigma_{\text{exp}} \approx 0.5 \text{ GPa}$ (gestrichelte Linie in Abb. 4.2) auf eine Verunreinigung des Materials zurückführen zu können, müssten die Schichten nach der Kristallisation demnach Fremdatome (z.B. B, H, O, N oder C) mit einer Gesamtkonzentration in der Größenordnung $N_{\text{imp}} \approx 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ enthalten. Eine so starke Verunreinigung der poly-Si Filme scheint zunächst unwahrscheinlich, ist aber angesichts der im Corning Glas vorhandenen hohen Konzentration insbesondere der Elemente Bor ($N_{\text{B}} \approx 2 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$), Aluminium ($N_{\text{Al}} \approx 3 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$) und

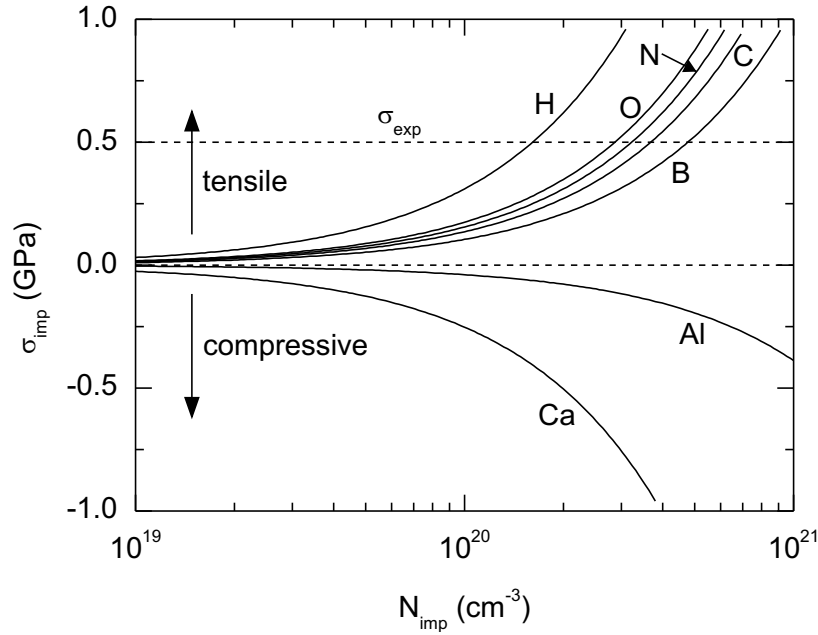


Abbildung 4.2: Verunreinigungsbedingter Stress σ_{imp} in Abhängigkeit von der Verunreinigungskonzentration N_{imp} für verschiedene Fremdatome in Si. σ_{exp} ist der experimentell für poly-Si auf Corning Glas bestimmte Stress.

Sauerstoff ($N_{\text{O}} \approx 4 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$) [152] durchaus nicht ausgeschlossen. Genaueren Aufschluss hierüber können allerdings nur weiterführende Untersuchungen der chemischen Zusammensetzung der poly-Si Filme z.B. mittels Sekundärionenmassenspektroskopie („secondary ion mass spectrometry“, SIMS) oder energiedispersiver Röntgenspektroskopie („energy dispersive X-ray spectroscopy“, EDX) liefern. Entsprechende Daten liegen allerdings noch nicht vor.

Unabhängig von den gerade diskutierten Ursachen wirken sich Verspannungen entscheidend auf die strukturellen und elektronischen Eigenschaften festphasenkristallisierter poly-Si Schichten aus. Der Stress in den Schichten beeinflusst z.B. direkt den Kristallisationsprozess und limitiert u.a. die maximale Kristallitgröße L [153]. Diese hängt gemäß

$$L \propto \left(\frac{v_g}{N_g} \right)^{1/3} \quad (4.5)$$

sowohl von der Nukleationsrate N_g als auch von der Kristallisationsgeschwindigkeit v_g ab [154]. Die bei Verspannung vorhandene Formänderungsenergie („strain energy“) stellt eine zusätzliche Energiebarriere für die Kristallisation dar und verringert die Kristallisationsgeschwindigkeit [153–155]. Durch Stress entstehen ferner ausgedehnte

Kristalldefekte wie Mikrozwillinge, Versetzungen, Stapelfehler und Kleinwinkelkorn-grenzen [156, 157], durch die zum Einen die Nukleationsrate vergrößert [153] und zum Anderen die für die elektronische Qualität des Materials entscheidende Defektdichte innerhalb der Körner erhöht wird [157]. Diese Beispiele verdeutlichen die Relevanz von Verspannungen für die Festphasenkristallisation von a-Si und die Eigenschaften der resultierenden poly-Si Filme.

4.2 Ladungstransport und Defekte

Im Gegensatz zu einkristallinem Silizium besteht poly-Si aus einer Vielzahl verschieden großer und unterschiedlich orientierter Kristallite (Körner), die durch sogenannte Korngrenzen voneinander getrennt sind. Die Fehlanpassung der Kristallgitter in den Korngrenzenbereichen führt zu einer Reihe kristallographischer Defekte, wie Fehlstellen, verspannten und gebrochenen Bindungen sowie Versetzungen. Zusätzlich neigen auch extrinsische Verunreinigungen dazu, zu den Korngrenzen zu diffundieren und sich dort anzusammeln. Viele dieser kristallographischen Störungen und extrinsischen Defekte besitzen energetische Zustände in der Bandlücke und beeinflussen somit auch die elektronischen Eigenschaften des Halbleiters. In der nun folgenden Diskussion werden die für die hier untersuchten festphasenkristallisierten poly-Si Filme entscheidenden Transportmechanismen und Defektparameter aus den experimentellen Transportdaten extrahiert. Hierzu wird der Ladungstransport zunächst auf einen für poly-Si typischen aktivierten Ladungstransport über Korngrenzen hin untersucht. Viele der untersuchten Filme zeigen allerdings auch eine deutliche Abweichung von diesem thermisch aktivierten Transport. Mögliche Ursachen für dieses Verhalten werden vorgestellt und anhand der experimentellen Daten diskutiert. Ein weiterer Teil der Diskussion beschäftigt sich dann mit der Wasserstoffpassivierung der poly-Si Filme. Hierbei wird deutlich, dass der Einfluss von Wasserstoff auf die elektronischen Eigenschaften von poly-Si weit über die häufig als einzig relevanter Prozess angesehene Passivierung von Dangling-Bonds hinausgeht. Die Ursache für den experimentell ebenfalls beobachteten großen Einfluss des Substrats auf den Ladungstransport in den hier untersuchten poly-Si Filmen ist dann Gegenstand des letzten Kapitels.

4.2.1 Ladungstransport über Potentialbarrieren: Das Seto-Modell

Zur Beschreibung des Ladungstransportes in polykristallinem Silizium wurde von Seto [30] das Konzept der thermionischen Emission über Potentialbarrieren eingeführt. In diesem Modell wird angenommen, dass sich an den Korngrenzen der Kristallite eine hohe Anzahl an Defektzuständen befindet. Durch das Einfangen freier Ladungsträger aus den Körnern werden diese Defekte teilweise oder auch vollständig ionisiert. Hierdurch entstehen Potentialbarrieren an den Korngrenzen, die von den verbleibenden freien Majoritätsladungsträgern durch thermionische Emission überwunden werden müssen. Das Modell wurde von Baccarani *et al.* [31] später verfeinert und zudem auf den Fall einer kontinuierlichen energetischen Verteilung der Defektzustände erweitert. Orton und Powell [158] berücksichtigten zusätzliche Fallbeispiele über das Verhältnis von Debye-Länge und Kristallitgröße und Kwok *et al.* [35] haben das Modell schließlich um eine dreidimensionale Beschreibung ergänzt. Zum besseren Verständnis der weiteren Diskussion werden die Modellrechnungen von Seto und Baccarani *et al.* im Folgenden kurz vorgestellt.

Für seine eindimensionalen Berechnungen geht Seto von den folgenden Annahmen aus: Das polykristalline Material besteht aus identischen idealen Kristalliten der Länge L . Es gibt nur eine Art von Dotieratomen (hier Akzeptoren), die vollständig ionisiert und in einer Konzentration N gleichmäßig in den Kristalliten verteilt sind. Die Korngrenzen haben im Vergleich zur Korngröße L eine vernachlässigbare Breite und enthalten Defektzustände mit einer Flächendichte N_t bei einer diskreten Energie E_t . Die Defektzustände sind ursprünglich elektrisch neutral und werden durch Einfang von Majoritätsladungsträgern aus den Kristalliten geladen. Hierdurch bildet sich in jeder Kristallithälfte eine als abrupt angenommene Verarmungszone der Breite $W = (\frac{L}{2} - l)$ aus. Unter den obigen Annahmen ergibt sich der Potentialverlauf durch Lösung der Poisson-Gleichung

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = \frac{qN}{\varepsilon} \quad (4.6)$$

mit den Randbedingungen, dass $V(x)$ stetig ist und die erste Ableitung $\frac{dV}{dx}$ an den Rändern der Verarmungszone ($x = l$) verschwindet. Hierbei ist q die Elementarladung

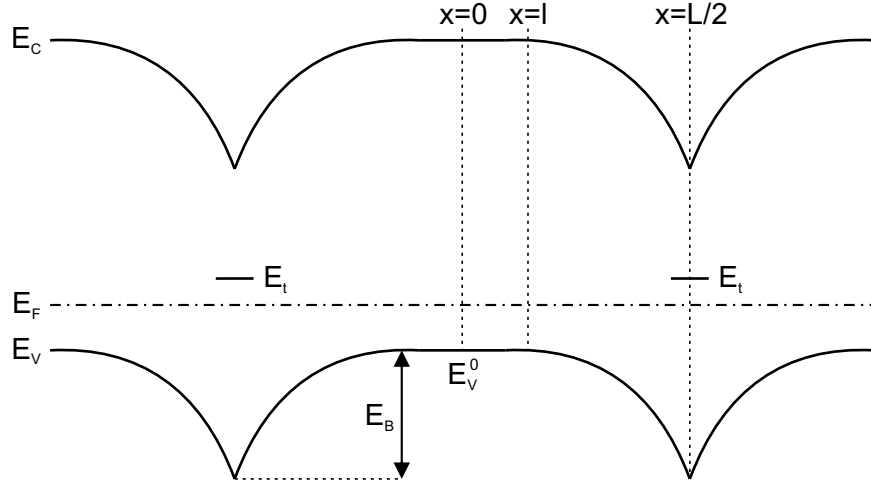


Abbildung 4.3: Räumlicher Verlauf von Leitungsband- (E_C) und Valenzbandkante (E_V) nach dem Barrierenmodell für p-typ poly-Si [30] mit Korngrenzende-fekten bei der Energie E_t . Die Kristallitgröße ist L und die Höhe der Potentialbarriere an den Korngrenzen ist E_B . $x = l$ markiert den Rand der Verarmungszone im Kristallit.

und ϵ die Dielektrizitätskonstante von poly-Si. Für $l < |x| < \frac{L}{2}$ erhält man

$$V(x) = \frac{qN}{2\epsilon} (x - l)^2 + \frac{E_V^0}{q} \quad (4.7)$$

wobei E_V^0 die energetische Lage der Valenzbandkante im neutralen Gebiet des Kristallits ($|x| < l$) ist. Der entsprechende räumliche Bandverlauf ist in Abb. 4.3 schematisch dargestellt. Für die Berechnung der Barrierenhöhe $E_B = q \left(V\left(\frac{L}{2}\right) - V(l) \right)$ müssen zwei unterschiedliche Fälle betrachtet werden:

1. Die Anzahl der Dotieratome im Korn ist geringer als die Anzahl der Defekte an den benachbarten Korngrenzen ($NL < N_t$). In diesem Fall sind die Defektzustände nur teilweise mit Majoritätsladungsträgern gefüllt und die Verarmungszone erstreckt sich über den gesamten Kristallit ($l = 0$). Für die Barrierenhöhe gilt dann:

$$E_B = \frac{q^2 L^2 N}{8\epsilon} \quad (4.8)$$

2. Im Korn sind mehr Dotieratome vorhanden als Defekte an den umliegenden Korngrenzen ($NL > N_t$). In diesem Fall sind alle Defektzustände an den Korngrenzen mit Majoritätsladungsträgern gefüllt und die Verarmungszone erstreckt sich nur

über einen Teil des Kristalliten ($l > 0$). Die Barrierenhöhe ergibt sich dann zu:

$$E_B = \frac{q^2 N_t^2}{8\epsilon N} \quad (4.9)$$

Geht man von einer konstanten Zustandsdichte der Defekte an den Korngrenzen N_t und einer festen Korngröße L aus, so steigt E_B zunächst linear mit der Dotierung bis zu einem Maximalwert bei $NL = N_t$ an und fällt bei weiter steigender Dotierung mit N^{-1} wieder ab.

Für den thermionischen Emissionsstrom J_{TE} von Majoritätsladungsträgern über die Barriere gilt bei nicht zu großer angelegter Spannung U_a ($U_a < \frac{kT}{q}$) und hinreichender Barrierenhöhe ($E_B > kT$):

$$J_{TE} = \frac{q^2 n_{av} L}{\sqrt{2\pi m^* kT}} \exp\left(-\frac{E_B}{kT}\right) \cdot U_a \quad (4.10)$$

Hierbei ist m^* die effektive Masse und n_{av} die mittlere Konzentration freier Ladungsträger im Kristallit, die man durch Integration der lokalen Ladungsträgerdichte und Teilen durch die Kristallitgröße L gemäß

$$n_{av} = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} N_V \exp\left(-\frac{qV(x) - E_F}{kT}\right) dx \quad (4.11)$$

erhält. Dabei ist N_V die effektive Zustandsdichte an der Valenzbandkante und E_F die Fermienergie, die sich aus der Ladungsneutralität zwischen Korngrenze und benachbarter Raumladungszone der Breite $W = (\frac{L}{2} - l)$ gemäß

$$2WN = \frac{N_t}{1 + \exp[(E_t - E_F)/kT]} \quad (4.12)$$

ergibt. Aus der Proportionalität zwischen Strom und angelegter Spannung in Gleichung 4.10 folgt ferner eine Leitfähigkeit

$$\sigma = \frac{q^2 L n_{av}}{\sqrt{2\pi m^* kT}} \exp\left(-\frac{E_B}{kT}\right) \quad (4.13)$$

Für die Berechnung von σ müssen wieder die zwei Fälle $NL < N_t$ (vollständige Verarmung der Körner) und $NL > N_t$ (teilweise Verarmung der Körner) unterschieden

werden. Durch Einsetzen der entsprechenden Beziehungen für die mittlere Konzentration freier Ladungsträger n_{av} im Kristallit erhält man

$$\sigma \propto \begin{cases} \exp\left(-\frac{E_V^0 - E_F}{kT}\right) & \text{für } NL < N_t \\ T^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{E_B}{kT}\right) & \text{für } NL > N_t \end{cases} \quad (4.14)$$

Die Leitfähigkeit zeigt demnach sowohl bei teilweiser als auch bei vollständiger Verarmung der Körner ein thermisch aktiviertes Verhalten. Für hoch dotierte Schichten bzw. eine geringe Defektkonzentration ($NL > N_t$) beobachtet man die thermionische Emission von freien Ladungsträger über die Potentialbarrieren an den Korngrenzen mit einer Aktivierungsenergie E_B , wohingegen für niedrig dotierte Schichten bzw. hohe Defektkonzentrationen ($NL < N_t$) die thermische Anregung von Ladungsträgern mit der Aktivierungsenergie $E_V^0 - E_F$ dominiert.

Bei seiner Betrachtung geht Seto nur von zwei Grenzfällen aus: Entweder sind die Körner vollständig verarmt, wobei die Korngrenzendefekte nur teilweise besetzt sind, oder die Körner sind nur teilweise verarmt und alle Defektzustände sind mit Majoritätsladungsträgern besetzt. Ein weiterer wichtiger Fall wird von Seto dagegen nicht diskutiert. Schiebt das Defektniveau nämlich mit zunehmender Besetzung der Zustände aufgrund der entstehenden Bandverbiegung in den Bereich der Fermienergie, so werden keine weiteren Defekte mehr besetzt, obwohl noch freie Ladungsträger im Korn vorhanden sind. Dementsprechend sind die Körner bereits für $NL < N_t$ nur noch teilweise verarmt und die Barrierenhöhe steigt nicht mehr proportional zu N an. Wie die folgenden Berechnungen von Baccarani *et al.* zeigen, tritt dieser Fall genau dann auf, wenn die Barrierenenergie E_B größer wird als der energetische Abstand ($E_F - E_t$) zwischen Fermienergie und Defektniveau. Für ihre Herleitung gehen Baccarani *et al.* ebenfalls von der in Abb. 4.3 dargestellten eindimensionalen Bandstruktur und einer thermionischen Emission von Majoritätsladungsträgern über die Potentialbarrieren gemäß

$$\sigma = \frac{q^2 L n_0}{\sqrt{2\pi m^* kT}} \exp\left(-\frac{E_B}{kT}\right) \quad (4.15)$$

aus. Im Gegensatz zu Seto verwenden sie aber nicht die gemittelte freie Ladungsträger-

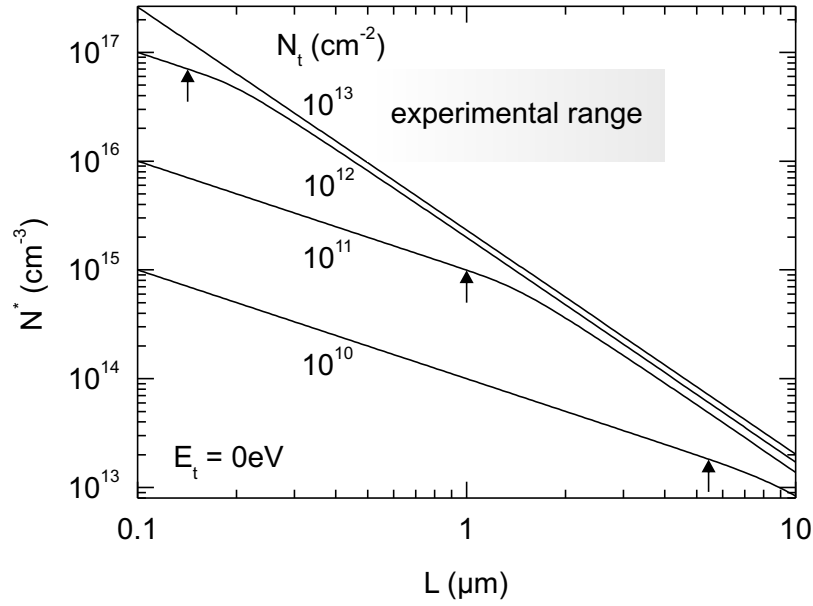


Abbildung 4.4: Kritische Konzentration N^* für den Übergang von vollständiger zu teilweiser Verarmung der Kristallite als Funktion der Korngröße L in Abhängigkeit von der Defektdichte N_t an den Korngrenzen. Die Grenzen des Seto-Modells ($N^* = N_t/L$) sind durch Pfeile gekennzeichnet.

konzentration n_{av} (Gleichung 4.11) sondern die Ladungsträgerkonzentration

$$n_0 = N_V \exp \left(-\frac{E_V^0 - E_F}{kT} \right) \quad (4.16)$$

in der Mitte des Kristalliten. Von Orton und Powell [158] wurde später gezeigt, dass das Verhältnis n_{av}/n_0 im Bereich 0.4 bis 1 liegt, solange die Debye-Länge L_D größer oder vergleichbar mit der Kristallitgröße L ist und somit keinen wesentlichen Einfluss auf die Ergebnisse hat.

Aus der Ladungsneutralität zwischen Korngrenze und Raumladungszone sowie aus der Beziehung zwischen Barrierenhöhe und Raumladungszonenweite ergibt sich folgende implizite Gleichung

$$N^* = \frac{8\epsilon}{q^2 L^2} \left\{ E_F - E_t + kT \ln \left[2 \left(\frac{N_t}{N^* L} - 1 \right) \right] \right\} \quad (4.17)$$

mit deren Hilfe die kritische Dotierkonzentration N^* für den Übergang von vollständiger zu teilweiser Verarmung berechnet werden kann. Abb. 4.4 zeigt den nach Gleichung

4.17 berechneten Verlauf von N^* als Funktion der Korngröße L für verschiedene Defektkonzentrationen N_t unter der Annahme eines Defektniveaus in der Mitte der Bandlücke ($E_t = 0$ eV). Wie man deutlich erkennt, gilt nur für kleine Korngrößen und/oder geringe Defektkonzentrationen die von Seto angenommene Beziehung $N^* = N_t/L$. Für größere Körner bzw. bei großen Defektdichten ist die kritische Dotierkonzentration dagegen proportional zu L^{-2} und somit für eine gegebene Korngröße deutlich kleiner als von Seto angenommen. Der Übergang zwischen beiden Bereichen ist in Abb. 4.4 durch Pfeile gekennzeichnet. Bei vollständiger Verarmung, d.h. für $N < N^*$ sind Barrierenhöhe E_B und Leitfähigkeit σ gegeben durch

$$E_B = \frac{q^2 L^2 N}{8\varepsilon} \quad (4.18)$$

$$\sigma \propto \exp\left(-\frac{E_V^0 - E_t}{kT}\right) \quad (4.19)$$

Dieses Ergebnis ist nahezu identisch mit der Berechnung von Seto mit dem wichtigen Unterschied, dass die Aktivierungsenergie der Leitfähigkeit bei Baccarani *et al.* explizit von der energetischen Lage des Defektniveaus abhängt. Bei teilweiser Verarmung der Körner, d.h. für $N > N^*$ wird die Barrierenhöhe dagegen durch folgende implizite Gleichung bestimmt:

$$E_B = E_F - E_t + kT \ln \left[2 \left(\frac{qN_t}{(8\varepsilon N E_B)^{1/2}} - 1 \right) \right] \quad (4.20)$$

Abb. 4.5 zeigt die nach Gleichung 4.18 und 4.20 berechnete Barrierenhöhe als Funktion der Dotierkonzentration für verschiedene Defektdichten unter der Annahme $E_t = 0$ eV und $L = 2 \mu\text{m}$. Für $N < N^*$ nimmt E_B gemäß Gleichung 4.18 linear mit N zu. Für $N > N^*$ müssen dagegen zwei Fälle unterschieden werden:

1. Ist die Barrierenhöhe E_B deutlich kleiner als der energetische Abstand zwischen der Fermienergie und dem Defektniveau ($E_B < E_F - E_t$), so gilt für die Barrierenhöhe und die Leitfähigkeit

$$E_B = \frac{q^2 N_t^2}{8\varepsilon N} \quad (4.21)$$

$$\sigma \propto n_0 \exp\left(-\frac{E_B}{kT}\right) \quad (4.22)$$

In diesem Fall stimmt das Ergebnis mit den Berechnungen von Seto überein, d.h.

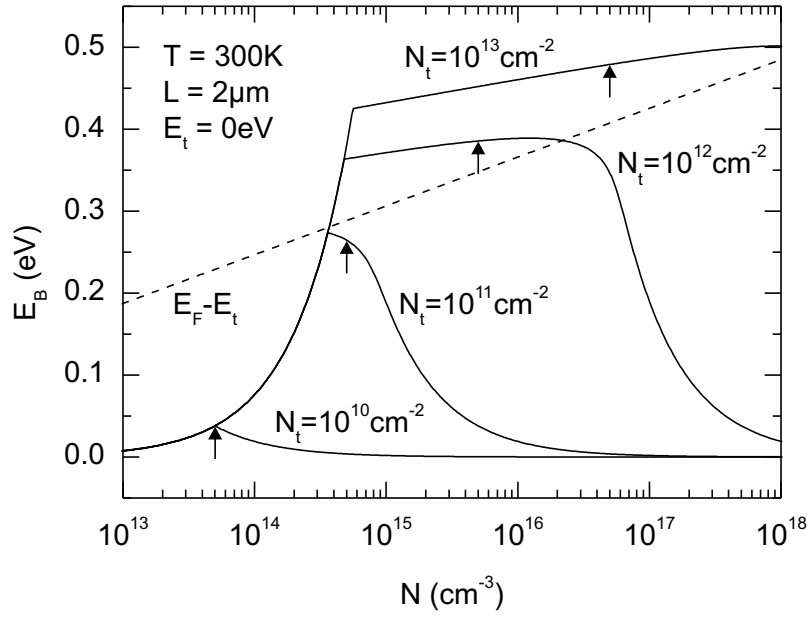


Abbildung 4.5: Barrierenhöhe E_B bei $T = 300$ K als Funktion der effektiven Dotierkonzentration N in Abhängigkeit von der Defektdichte N_t an den Korngrenzen für eine Korngröße von $L = 2$ μm . Die Pfeile markieren die kritische Konzentration $N^* = N_t/L$ im Seto-Modell.

E_B nimmt proportional zu N^{-1} ab und die Aktivierungsenergie der Leitfähigkeit entspricht (abgesehen von einer eventuellen Aktivierung von n_0) der Barrierenhöhe.

2. Gilt dagegen $E_B > E_F - E_t$, so befinden sich die Defektzustände an der Korngrenze aufgrund der Bandverbiegung im Bereich der Fermienergie und es ergibt sich eine vom Seto-Modell deutlich abweichende Barrierenhöhe und Leitfähigkeit gemäß

$$E_B \approx E_V^0 - E_t \quad (4.23)$$

$$\sigma \propto \exp\left(-\frac{E_V^0 - E_t}{kT}\right) \quad (4.24)$$

Dieser letzte Bereich, in dem E_B weitestgehend unabhängig von N ist (Plateau in Abb. 4.5) und der in Setos Theorie vollständig vernachlässigt wurde, ist umso ausgedehnter, je größer die Körner sind und je höher die Defektdichte an den Korngrenzen ist. In Abb. 4.6 ist die nach dem Modell von Baccarani berechnete Aktivierungsenergie der Leitfähigkeit E_A als Funktion der Dotierkonzentration für verschiedene Defektdichten dargestellt. Hierbei wurde von einer Korngröße von $L = 2$ μm und einem Defektniveau

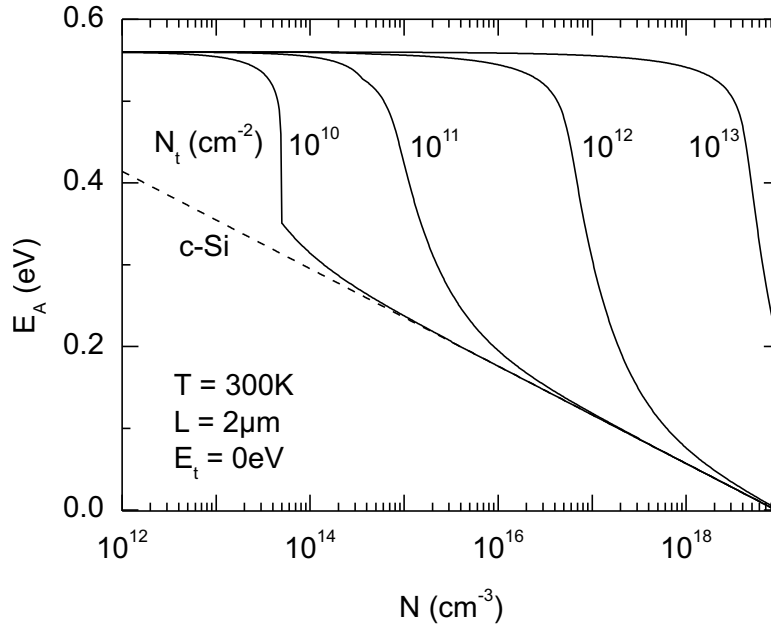


Abbildung 4.6: Aktivierungsenergie E_A bei $T = 300$ K als Funktion der effektiven Dotierkonzentration N in Abhängigkeit von der Defektdichte N_t an den Korngrenzen für eine Korngröße von $L = 2$ μm .

in der Mitte der Bandlücke ausgegangen. Für geringe Defektkonzentrationen (bzw. kleine Körner) beobachtet man einen abrupten Übergang zwischen $E_A \approx (E_V^0 - E_F + E_B)$ und $E_A \approx (E_V^0 - E_t)$ beim Einsetzen der vollständigen Verarmung. Für hohe Defektkonzentrationen (bzw. große Körner) ist die Aktivierungsenergie dagegen nahezu kontinuierlich und beträgt sowohl bei vollständiger als auch bei teilweiser Verarmung $E_A \approx (E_V^0 - E_t)$. Über die Beziehung $\sigma = qn_0\mu_{\text{eff}}$ und Gleichung 4.15 kann ferner eine effektive Beweglichkeit

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{qL}{\sqrt{2\pi m^* kT}} \exp\left(-\frac{E_B}{kT}\right) \quad (4.25)$$

definiert werden. Diese ist mit der Aktivierungsenergie E_B thermisch aktiviert und somit gemäß Abb. 4.5 über einen weiten Dotierbereich deutlich geringer als in einkristallinem Silizium.

Nach dem Transportmodell von Seto bzw. Bacarani werden sowohl die mittlere Ladungsträgerkonzentration als auch die Beweglichkeit in poly-Si vom Verhältnis zwischen der Korngröße, der Defektdichte an den Korngrenzen und der Nettodotierung innerhalb der Kristallite bestimmt. Die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten festphasenkristallisierten poly-Si Filme haben eine mittlere Korngröße von $L \approx 2$ μm (amorph

abgeschieden, $T_d \leq 300\text{ °C}$) bzw. $L < 100\text{ nm}$ (polykristallin abgeschieden, $T_d \geq 400\text{ °C}$) und eine nominelle Bor-Dotierung von $N \approx 2 \cdot 10^{16}\text{ cm}^{-3}$. Da die nominelle Dotierkonzentration nur mittels einer vorhandenen Kalibrationskurve über die Temperatur der Bor-Effusionszelle bestimmt wurde, ist von einer größeren Abweichung der realen Dotierkonzentration vom nominellen Wert auszugehen. Für die folgenden Betrachtungen wird deshalb entsprechend der aus Halleffektmessungen an nur teilweise verarmten Filmen (Corning Glas, $150\text{ °C} \leq T_d \leq 400\text{ °C}$ und SiO_x , $100\text{ °C} \leq T_d \leq 400\text{ °C}$) bestimmten freien Ladungsträgerkonzentration eine tatsächliche Dotierung im Bereich $1 \cdot 10^{16}\text{ cm}^{-3} \leq N \leq 7 \cdot 10^{16}\text{ cm}^{-3}$ angenommen. Des Weiteren liegt der Schwerpunkt der folgenden Diskussion auf den amorph abgeschiedenen und anschließend festphasenkristallisierten poly-Si Schichten. Der für diese Filme zutreffende Korngrößen- bzw. Dotierungsbereich ist in Abb. 4.4 durch eine grau schraffierte Fläche dargestellt und liegt selbst unter der Annahme einer ungewöhnlich hohen Korngrenzendefektdichte von $N_t \approx 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ deutlich oberhalb der berechneten kritischen Konzentration für den Übergang von vollständiger zu teilweiser Verarmung. Ausgehend von der Korngröße und der nominellen Dotierung der Proben sollten somit alle bei $T_d \leq 300\text{ °C}$ deponierten poly-Si Filme nur eine teilweise Verarmung der Körner aufweisen und die Löcherkonzentration sollte der Dotierkonzentration entsprechen. Betrachtet man die experimentellen Daten in Abb. 3.7, so trifft dies nur auf die bei $T_d \geq 150\text{ °C}$ auf Corning Glas und SiO_x abgeschiedenen poly-Si Proben zu. Bei kleineren Depositionstemperaturen bzw. für poly-Si Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas liegt die freie Ladungsträgerkonzentration dagegen z.T. deutlich unterhalb der Dotierkonzentration. Ein solches Verhalten deutet auf eine starke Verarmung hin und kann nach dem Modell von Seto/Baccarani entweder mit einer höheren Defektdichte an den Korngrenzen oder mit einer im Vergleich zur nominellen Dotierung verminderten effektiven Dotierkonzentration in den Filmen erklärt werden. In ersterem Fall müsste die Defektdichte insbesondere für die bei den Filmen auf SiN/Borofloat Glas beobachtete vollständige Verarmung allerdings physikalisch nicht sinnvolle Werte von $N_t > 10^{18}\text{ cm}^{-2}$ annehmen. Eine (vollständige) Verarmung der Körner alleine aufgrund von Korngrenzendefekten kann bei den hier betrachteten poly-Si Schichten mit Korngrößen von $L \approx 2\text{ }\mu\text{m}$ somit ausgeschlossen werden. Demnach kommt als Ursache für die geringe Ladungsträgerkonzentration in diesen Filmen nur eine gegenüber der nominellen Dotierung reduzierte effektive Dotierkonzentration aufgrund z.B. kompensierender Donatoren und/oder tiefer Störstellen in den Kristalliten in Frage. Die Konzentration dieser Zustände ist dabei für poly-Si Filme

auf SiN/Borofloat Glas offensichtlich deutlich größer als für Schichten auf Corning Glas und nimmt für Depositionstemperaturen $T_d < 150\text{ °C}$ zu. Die Annahme eines Anstiegs der Zustandsdichte innerhalb der Bandlücke der Kristallite zu niedrigen Depositionstemperaturen ist hierbei konsistent mit der beobachteten stärkeren Defektabsorption und geringeren Photoleitfähigkeit der bei $T_d = 50\text{ °C}$ abgeschiedenen poly-Si Schichten im Vergleich zu den bei $T_d = 300\text{ °C}$ deponierten Schichten. Eine entsprechende Relation in der Defektabsorption zwischen poly-Si Filmen auf Corning Glas und SiN/Borofloat Glas wird dagegen nicht beobachtet, was eventuell auf unterschiedliche Neutralisations-/Kompensationsmechanismen auf den beiden Substraten hindeutet. Eine Diskussion möglicher Ursachen für den Einfluss der Depositionstemperatur und des Substrats findet im Abschnitt 4.2.7 statt.

Durch Anpassung des Korngrenzenmodells an die experimentell bestimmten Aktivierungsenergien erhält man zusätzlich Informationen über die Konzentration und die energetische Lage der Korngrenzendefekte sowie die effektive Akzeptorkonzentration innerhalb der Kristallite. Zur Bestimmung dieser wichtigen Größen wurde das Baccarani-Modell numerisch gelöst und durch Variation der Parameter an die experimentellen Daten angepasst. Dabei muss allerdings berücksichtigt werden, dass die aus Leitfähigkeits- und Halleffektmessungen bestimmten Aktivierungsenergien E_A^σ bzw. E_A^n aufgrund einer statistischen Verschiebung der Fermienergie nicht den tatsächlichen Energiebarrieren $E_V^0 - E_F(T) + E_B$ bzw. $E_V^0 - E_F(T)$ bei der Temperatur T entsprechen. Wie im Abschnitt 4.2.4 gezeigt wird, kann das Fermi-niveau im untersuchten Temperaturbereich allerdings gut durch einen linearen Verlauf der Form

$$E_F(T) = E_F^*(0) + \gamma_F^* T \quad (4.26)$$

mit dem in Tabelle 4.3 angegebenen Temperaturkoeffizienten γ_F^* und der zu $T = 0\text{ K}$ extrapolierten Fermienergie $E_F^*(0)$ beschrieben werden. Unter Berücksichtigung dieser statistischen Verschiebung der Fermienergie erhält man aus den experimentell bestimmten Werten E_A^σ bzw. E_A^n dann die mit den Modellrechnungen vergleichbaren Größen

$$\tilde{E}_A^\sigma(T) = E_A^\sigma - \gamma_F^* T \quad (4.27)$$

$$\tilde{E}_A^n(T) = E_A^n - \gamma_F^* T \quad (4.28)$$

Die Aktivierungsenergie der Beweglichkeit hängt dagegen nicht von $E_F(T)$ ab und

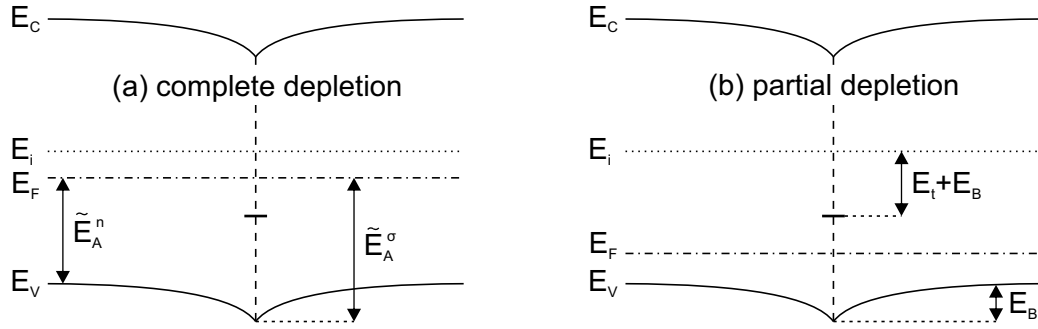


Abbildung 4.7: Räumlicher Bandverlauf über eine Korngrenze in p-typ poly-Si bei (a) vollständiger und (b) teilweiser Verarmung der Kristallite. $\tilde{E}_A^n$ und $\tilde{E}_A^\sigma$ sind die Aktivierungsenergie der Ladungsträgerkonzentration bzw. der Leitfähigkeit, E_t ist das Defektenergieniveau bezogen auf die Bandmitte an der Korngrenze und E_B ist die Barrierenhöhe.

entspricht somit der Barrierenhöhe E_B

$$\tilde{E}_A^\mu = E_A^\mu = E_B \quad (4.29)$$

Abb. 4.7 zeigt den Bandverlauf über eine Korngrenze bei vollständiger (Abb. 4.7 (a)) sowie bei teilweiser (Abb. 4.7 (b)) Verarmung der Kristallite und veranschaulicht die im Text verwendeten Energieniveaus und Aktivierungsenergien. In Abb. 4.8 ist der durch gleichzeitige Anpassung an die experimentellen Daten der bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ (Kreise) und $T_d = 300^\circ\text{C}$ (Quadrate) auf Corning Glas deponierten poly-Si Filme berechnete Verlauf der Barrierenhöhe E_B (punktierter Linie) sowie der Aktivierungsenergien $\tilde{E}_A^\sigma$ (gestrichelte Linie) und $\tilde{E}_A^n$ (durchgezogene Linie) als Funktion der effektiven Akzeptorkonzentration N bei $T = 300\text{ K}$ dargestellt. Für die Berechnungen wurde dabei von folgenden Annahmen ausgegangen: 1) Die mittlere Korngröße ist für beide Filme gleich und beträgt $L = 2.4\text{ }\mu\text{m}$, 2) die Akzeptorkonzentration der nur teilweise verarmten Schicht ($T_d = 300^\circ\text{C}$) entspricht der aus Halleffektmessungen bei Raumtemperatur bestimmten Ladungsträgerkonzentration von $N \approx n \approx 4.2 \cdot 10^{16}\text{ cm}^{-3}$ und 3) die Konzentration und die energetische Lage der Korngrenzendefekte sind für beide Filme identisch. Letztere Annahme ist nötig, da das Modell im Fall der vollständigen Verarmung ($T_d = 50^\circ\text{C}$) unabhängig von der Defektdichte an der Korngrenze ist und bei teilweiser Verarmung ($T_d = 300^\circ\text{C}$) nicht von der energetischen Lage der Korngrenzendefekte abhängt. Unter diesen Voraussetzungen liefert das Modell folgende Ergebnisse:

1. Die Korngrenzendefektdichte beträgt $N_t \approx 3.8 \cdot 10^{11}\text{ cm}^{-2}$.

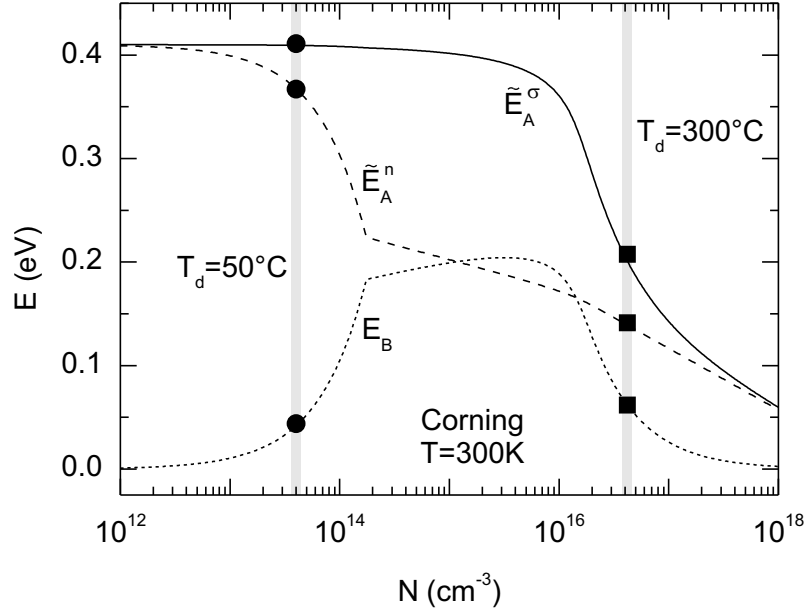


Abbildung 4.8: Aktivierungsenergie der Ladungsträgerkonzentration $\tilde{E}_A^n$ und der Leitfähigkeit $\tilde{E}_A^\sigma$ sowie Barrierenhöhe E_B bei $T = 300\text{ K}$ als Funktion der effektiven Dotierkonzentration N . Die Punkte entsprechen den experimentell bestimmten Werten der bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ (Kreise) und $T_d = 300^\circ\text{C}$ (Quadrate) auf Corning Glas deponierten poly-Si Filme.

2. Das Defektniveau an der Korngrenze liegt unterhalb der Bandlückenmitte bei $E_t - E_V \approx 0.4\text{ eV}$.
3. Die Konzentration elektrisch aktiver unkompensierter Akzeptoren in der bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Schicht beträgt $N \approx 4 \cdot 10^{13}\text{ cm}^{-3}$.

Ähnliche Korngrenzendefektdichten im Bereich $10^{11}\text{ cm}^{-2} \leq N_t \leq 10^{12}\text{ cm}^{-2}$ werden auch von anderen Autoren berichtet [159–161] und sind typisch für unpassiviertes poly-Si [162]. Die energetische Lage des Defektniveaus knapp unterhalb der Bandlückenmitte deutet ferner auf intrinsische Dangling-Bond Defekte als Ursache für die Korngrenzenbarrieren hin. Das hierfür in p-dotiertem Silizium notwendige Donatorniveau entspricht in diesem Fall dem Umladungsniveau $D^{+/0}$ zwischen unbesetzten und einfach besetzten Dangling-Bonds. Sowohl theoretische Berechnungen [163] als auch experimentelle Untersuchungen [164–166] finden dieses Energieniveau im Bereich $0.2\text{ eV} \leq E_t - E_V \leq 0.4\text{ eV}$ und sind somit konsistent mit der hier bestimmten energetischen Lage der Korngrenzendefekte. Die geringe Konzentration elektrisch aktiver Akzeptoren in der bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ deponierten Schicht bestätigt zudem die Vermutung

einer hohen Defekt-/Zustandsdichte innerhalb der Bandlücke der Kristallite.

Die vorangegangene Interpretation der experimentellen Ergebnisse nach dem Korn-grenzenmodell basiert auf der Annahme, dass die aus Halleffektmessungen bestimmte Ladungsträgerkonzentration n mit der mittleren Konzentration freier Ladungsträger n_0 innerhalb der Kristallite übereinstimmt und dass die Hallbeweglichkeit μ_H im Falle eines barrierenlimitierten Transportes der in Gleichung 4.25 angegebenen effektiven Beweglichkeit μ_{eff} entspricht. Da dieser Zusammenhang aufgrund der doch deutlich abweichenden elektronischen Bandstrukturen von c-Si und poly-Si nicht ohne weiteres ersichtlich ist, wird im Folgenden kurz auf die Interpretation des Halleffektes in polykristallinen Halbleitern eingegangen.

4.2.2 Halleffekt in polykristallinen Halbleitern

Die Interpretation von Halleffektmessungen an einkristallinen Halbleitern mit homogener Ladungsträgerkonzentration n und Driftbeweglichkeit μ ist unkompliziert und liefert für die Hallkonstante R_H und die Hallbeweglichkeit μ_H (siehe z.B. [74]):

$$R_H = \frac{r}{en} \quad (4.30)$$

$$\mu_H = \sigma R_H = r\mu \quad (4.31)$$

Der Streufaktor r (der für alle Streumechanismen nur zwischen 1 und 2 variiert) stellt hierbei die einzige Unsicherheit in der Relation zwischen R_H und n bzw. μ_H und μ dar. Üblicherweise werden die Beziehungen 4.30 und 4.31 auch für polykristalline Materialien verwendet, wobei zur Vereinfachung (und aufgrund der Unkenntnis der vorhandenen Streumechanismen) $r = 1$ gesetzt wird [158]. Eine Rechtfertigung hierfür liefern geometrische 2-Phasen-Modelle, mit denen sich der Halleffekt in inhomogenen Materialien beschreiben lässt. Wie im Folgenden gezeigt wird, erhält man aus solchen Modellrechnungen bei Berücksichtigung der Bandstruktur polykristalliner Materialien Ausdrücke für die Hallbeweglichkeit und die Hallkonstante, die mit denen im vorigen Abschnitt hergeleiteten gut übereinstimmen.

Ausgangspunkt für die Beschreibung ist das von Volger [167] vorgeschlagene und in Abb. 4.9 dargestellte Mischmaterial bestehend aus kubischen „Körnern“ eines Materials 1 mit spezifischem Widerstand ρ_1 , Beweglichkeit μ_1 und Ladungsträgerkonzentration n_1 , die von einem Material 2 mit ρ_2 , μ_2 und n_2 umgeben sind. Abb. 4.10 (a) zeigt

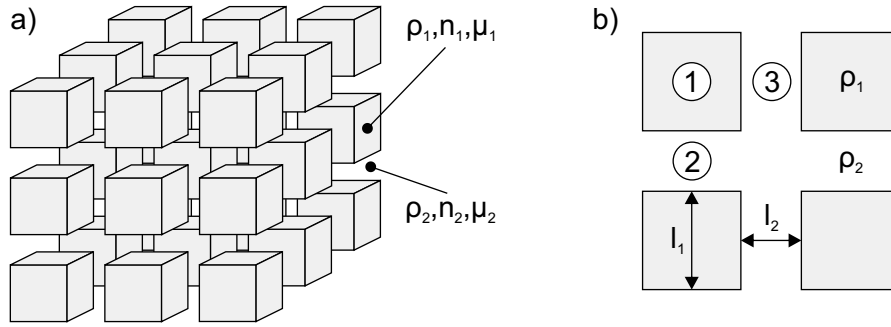


Abbildung 4.9: (a) Modell eines inhomogenen Mediums nach Volger [167] bestehend aus Würfeln eines Materials 1 mit den elektrischen Eigenschaften ρ_1, n_1, μ_1 in einer Matrix aus einem Material 2 mit den Eigenschaften ρ_2, n_2, μ_2 . (b) Ausschnitt aus Abb. (a) zur Verdeutlichung der im Text verwendeten Bereiche 1, 2 und 3 sowie der Abmessungen l_1 und l_2 .

das entsprechende Ersatzschaltbild, mit dessen Hilfe sich der effektive spezifische Widerstand ρ^* des Mischmaterials berechnen lässt. Hierbei sind r_1, r_2 und r_3 die Widerstände der Regionen 1, 2 und 3 und i_1, i_2 und i_3 die Gesamtströme, die in diesen Bereichen fließen. Die zwei Widerstände r_2 repräsentieren dabei die dünnen Bereiche des Materials zwischen den „Körnern“ parallel und senkrecht zum Magnetfeld. Unter der Voraussetzung, dass die Bereiche zwischen den „Körnern“ deutlich weniger leitfähig sind als die Körner selbst ($\rho_2 \gg \rho_1$), erhält man für die effektive spezifische Leitfähigkeit:

$$\rho^* = \rho_1 + \frac{l_2}{l_1} \rho_2 \quad (4.32)$$

Für die Bestimmung des Halleffekts bzw. der Hallkonstanten wird davon ausgegangen, dass in jedem der drei Bereiche eine Hallspannung V_1, V_2 und V_3 erzeugt wird, wobei $V_n \propto i_n$ ($n=1, 2, 3$) gilt (ohmsches Verhalten). Die Gesamthallspannung ergibt sich dann durch Summation dieser drei Hallspannungen entsprechend des in Abb. 4.10 (b) gezeigten Ersatzschaltbildes nach Orton und Powell [158]. Ähnliche Ersatzschaltbilder werden auch von anderen Autoren angenommen [168–170]. Ein wesentliches Merkmal dieser Ersatzschaltkreise ist, dass die im Bereich 3 aufgrund der geringeren Ladungsträgerkonzentration entstehende relativ große Hallspannung durch den deutlich besser leitfähigen Bereich 1 kurzgeschlossen wird, wodurch ein zirkulierender Strom entsteht. Unter der bereits zuvor gemachten Annahme $\rho_2 \gg \rho_1$ gilt für die effektive

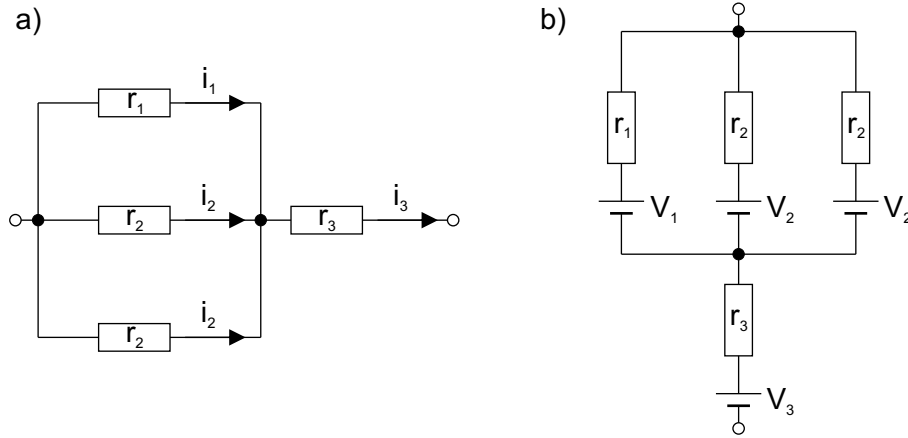


Abbildung 4.10: Ersatzschaltbilder für das Modell aus Abb. 4.9 zur Berechnung (a) des effektiven spezifischen Widerstands ρ^* und (b) der effektiven Hallkonstante R_H^* . Die Indizes beziehen sich auf die in Abb. 4.9 (b) bezeichneten Bereiche.

Hallkonstante R_H^* und die effektive Hallbeweglichkeit $\mu_H^* = R_H^*/\rho^*$:

$$R_H^* = R_1 + 2 \frac{\rho_1 l_2}{\rho_2 l_1} R_2 \quad (4.33)$$

$$\mu_H^* = \left(\frac{\rho_1/\rho_2}{\rho_1/\rho_2 + l_2/l_1} \right) \left(\mu_1 + 2 \frac{l_2}{l_1} \mu_2 \right) \quad (4.34)$$

Wie identische Berechnungen mit anderen idealen geometrischen Strukturen (z.B. Kugeln statt Würfeln [171]) zeigen, sind die nach dem 2-Phasen-Modell bestimmten Ergebnisse weitestgehend unabhängig von der genau betrachteten Geometrie und sollten somit auch auf reale Systeme wie z.B. polykristalline Materialien anwendbar sein.

Ausgehend von den allgemeinen Ergebnissen für den spezifischen Widerstand und den Halleffekt in inhomogenen Materialien kann jetzt der Spezialfall eines polykristallinen Halbleiters betrachtet werden. Die Regionen mit geringerer Leitfähigkeit zwischen den Körnern (Bereich 3 in Abb. 4.9 (b)) entsprechen in diesem Fall den Potentialbarrieren an den Korngrenzen und können als zwei gegeneinander geschaltete Schottky-Dioden aufgefasst werden. Für den durch thermionische Emission bestimmten Stromfluss im Bereich 3 zwischen den Körnern gilt dann:

$$i_3 = \sqrt{\frac{kT}{2\pi m^*}} q n_1 \exp\left(-\frac{\phi_B}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV_B}{kT}\right) - 1 \right] \quad (4.35)$$

Hierbei ist V_B der Spannungsabfall über die erste der beiden Schottky-Dioden, ϕ_B die Barrierenhöhe an der Korngrenze und n_1 die Ladungsträgerkonzentration im Korn (Bereich 1 in Abb. 4.9 (b)). Bei kleiner angelegter Spannung ($V < kT/q$) ist der Spannungsabfall über beide Barrieren gleich groß und proportional zum Strom. In diesem Fall kann für den Bereich 3 ein effektiver spezifischer Widerstand

$$\frac{1}{r_3} = qn_1\mu_B L \quad (4.36)$$

definiert werden, wobei $L = (l_1 + l_2)$ die Gesamtkorngröße ist. Die ebenfalls in Gleichung 4.36 auftretende Größe μ_B hat die Dimension einer Beweglichkeit und ist gegeben durch

$$\mu_B = \frac{qL}{\sqrt{2\pi m^* kT}} \exp\left(-\frac{\phi_B}{kT}\right) \quad (4.37)$$

Mit der Beziehung $r_3 = l_1 L / l_2 \rho_2$ ergibt sich durch Einsetzen in Gleichung 4.32 schließlich für die effektive spezifische Leitfähigkeit:

$$\rho^* = \rho_1 + \frac{1}{qn_1\mu_B} \quad (4.38)$$

Für die Berechnung der effektiven Hallkonstante R_H^* ist entscheidend, dass die freie Ladungsträgerkonzentration n_2 im Bereich der Barriere um einen Faktor $\exp(-\phi_B/kT)$ kleiner ist als n_1 und somit der spezifische Widerstand im Bereich 2 deutlich größer ist als im Bereich 1 ($\rho_2 \gg \rho_1$). Unter dieser Bedingung erhält man aus Gleichung 4.33 für die effektive Hallkonstante und die sich daraus ergebende effektive Hallbeweglichkeit von polykristallinem Material:

$$R_H^* = \frac{1}{qn^*} \approx \frac{1}{qn_1} = R_1 \quad (4.39)$$

$$\frac{1}{\mu_H^*} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_B} \quad (4.40)$$

Die aus Halleffektmessungen an polykristallinen Halbleitern bestimmte Ladungsträgerkonzentration n^* stimmt demnach mit der Konzentration n_1 im Inneren der Kristallite überein und die gemessene Hallbeweglichkeit μ_H^* entspricht entweder der Ladungsträgerbeweglichkeit μ_1 in den kristallinen Körnern (verschwindende Potentialbarrieren, $\mu_1 \ll \mu_B(\phi)$) oder der in Gleichung 4.25 angegebenen effektiven Ladungsträgerbeweglichkeit μ_{eff} (große Potentialbarrieren, $\mu_1 \gg \mu_B(\phi)$).

4.2.3 Abweichung vom thermisch aktivierten Transport

Nach den Modellen sowohl von Seto als auch von Baccarani *et al.* ist die spezifische Leitfähigkeit von polykristallinem Silizium thermisch aktiviert und sollte somit in einer Arrhenius-Darstellung einen linearen Verlauf zeigen. Für die hier untersuchten poly-Si Schichten wird ein solches Verhalten allerdings nur im Bereich hoher Temperaturen beobachtet. Zu tiefen Temperaturen ist dagegen insbesondere bei den Schichten mit hoher Leitfähigkeit (T_d um 300 °C auf Corning Glas) eine deutliche Krümmung in den $\sigma(T^{-1})$ -Kurven zu erkennen. Experimentell ist ein solches Temperaturverhalten nicht ungewöhnlich [39] und wird sowohl bei Leitfähigkeitsuntersuchungen an polykristallinen Halbleitern (wie z.B. poly-Si [159], μc -Si [172]) als auch an einzelnen Korngrenzen (z.B. in Si [173], Ge [174] und GaAs [89]) beobachtet. Im Folgenden werden die in der Literatur für die Abweichung von einem reinen thermisch aktivierten Verhalten vorgeschlagenen Mechanismen vorgestellt und ihre Anwendbarkeit auf die hier untersuchten poly-Si Schichten diskutiert.

Das aktivierte Verhalten der Leitfähigkeit im Seto-Modell basiert auf der Annahme, dass der Ladungstransport in poly-Si ausschließlich durch thermionische Emission freier Ladungsträger über die Potentialbarrieren an den Korngrenzen bestimmt wird. Diese Annahme gilt allerdings nur für große Barrierenhöhen und breite Raumladungszonen, wie sie bei teilweiser Verarmung und nicht zu hoher Dotierung vorliegen. Sind die poly-Si Schichten dagegen hoch dotiert, so ist die Barrierenbreite klein im Vergleich zur Kristallitgröße und die Potentialbarrieren können von den Ladungsträgern nicht nur durch thermionische Emission, sondern auch durch Tunnelprozesse bzw. eine Kombination aus beidem (thermionische Feldemission) überwunden werden. Mit abnehmender Temperatur nimmt dabei der relative Anteil des Tunnelstroms zu. Die Temperaturabhängigkeit der Dunkelleitfähigkeit kann in diesem Fall durch die Kombination aus einem aktivierten Verhalten bei hohen Temperaturen und einem Tunnelbeitrag im Tieftemperaturbereich beschrieben werden, der zu einem deutlichen Abflachen der $\sigma(T^{-1})$ -Kurven führt [38]. Wie Untersuchungen an μc -Si [175] und poly-Te [176] zeigen, liegt die kritische Barrierenweite für das Einsetzen eines Tunnelbeitrags bei etwa 5 nm. Die Breite der Verarmungszone W kann über die Barrierenhöhe E_B gemäß

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon E_B}{q^2 N}} \quad (4.41)$$

bestimmt werden. Geht man bei den hier untersuchten poly-Si Filmen von einer maximalen Dotierkonzentration von $N = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (siehe Hallergebnisse der bei $T_d = 300^\circ\text{C}$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Schicht) und einer Korngrenzendefektdichte von $N_t \approx 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ in der Mitte der Bandlücke aus, so beträgt die minimale Barrierenweite $W \approx 100 \text{ nm}$. Ein merklicher Beitrag des Tunnelstroms zur Gesamtleitfähigkeit ist bei den hier untersuchten Proben demnach nicht zu erwarten. Dieses Ergebnis ist konsistent mit Leitfähigkeitsuntersuchungen an Si-Bikristallen, die bis zu einer Dotierung von $N = 1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ebenfalls ein nahezu reines Arrhenius-Verhalten der Leitfähigkeit zeigen [2].

Eine weitere Ursache für die Abweichung vom einfach aktivierten Transportverhalten liegt in der Inhomogenität von poly-Si begründet. In seinem Modell geht Seto von einer sehr idealisierten Struktur des polykristallinen Materials mit gleich großen Körnern, einheitlicher Dotierung und einer für alle Korngrenzen identischen Defektdichte aus. Reale poly-Si Schichten haben dagegen eine gewisse Verteilung von Korngrößen und auch die Korngrenzen unterscheiden sich häufig stark hinsichtlich ihrer elektrischen Eigenschaften. Zusätzlich kann z.B. aufgrund unterschiedlich starker Segregation auch die Dotierung von Korn zu Korn fluktuieren. Da E_B nach Gleichung 4.18 bzw. 4.21 von allen drei Größen abhängt, ist anzunehmen, dass in realen poly-Si Filmen sowohl eine räumliche als auch eine energetische Verteilung von Barrierenhöhen vorliegt. Der Einfluss einer solchen Variation der Barrierenhöhe auf das Temperaturverhalten der Leitfähigkeit wurde von Werner theoretisch untersucht [39]. Hierfür ging er von einer gaußförmigen Verteilung der Barrierenhöhen E_B um einen Mittelwert $\bar{E}_B$ mit der Standardabweichung σ_B gemäß

$$P(E_B) = \frac{1}{\sigma_B \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\bar{E}_B - E_B)^2}{2\sigma_B^2}\right) \quad (4.42)$$

aus. Setzt man diese Gaußverteilung an Stelle von E_B in den Ausdruck für die Leitfähigkeit bei thermionischer Emission (Gleichung 4.15) ein und integriert über die Energie, so lässt sich das Ergebnis durch Einführung einer effektiven Barrierenhöhe

$$E_{B,\text{eff}}(T) = \bar{E}_B - \frac{\sigma_B^2}{2kT} \quad (4.43)$$

wieder durch eine Gleichung identischer Form ausdrücken. Die effektive Barrierenhöhe ist dabei stets kleiner als die mittlere Barrierenhöhe $\bar{E}_B$ und nimmt mit sinkender

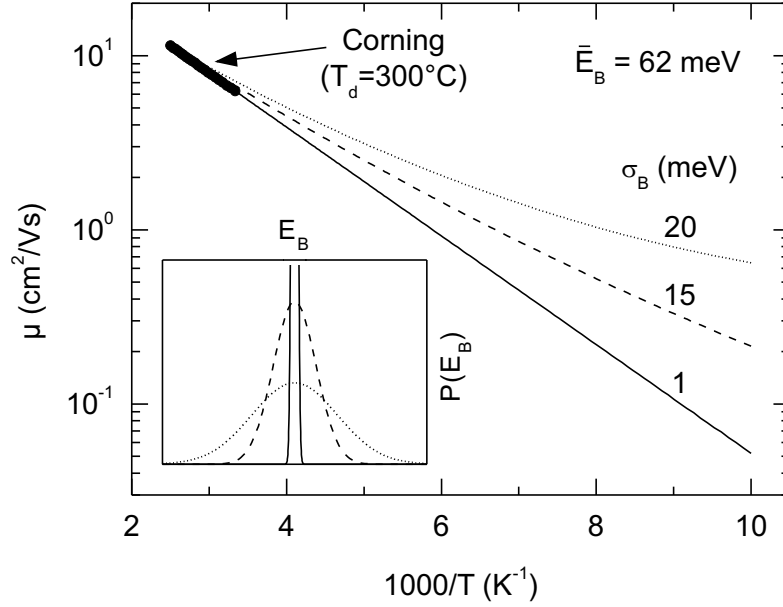


Abbildung 4.11: Beweglichkeit $\mu(T)$ nach Gleichung 4.44 für drei Barrierenhöhenverteilungen $P(E_B)$ mit Mittelwert $\bar{E}_B$ und Standardabweichung σ_B (eingebettete Abb.). Die Punkte sind die experimentellen Daten des bei $T_d = 300$ °C auf Corning Glas abgeschiedenen poly-Si Films.

Temperatur ab. Der Ladungstransport findet demnach hauptsächlich über Korngrenzen mit geringen Barrierenhöhen statt und zu tiefen Temperaturen nimmt der relative Anteil der kleineren Barrieren am Stromtransport zu. Die Temperaturabhängigkeit der Beweglichkeit kann in diesem Fall durch

$$\mu(T) = \frac{qL}{\sqrt{2\pi m^* kT}} \exp\left(-\frac{\bar{E}_B - \sigma_B^2/2kT}{kT}\right) \quad (4.44)$$

beschrieben werden und zeigt in einer Arrhenius-Darstellung ein deutliches Abflachen zu tiefen Temperaturen. Abb. 4.11 veranschaulicht den nach Gleichung 4.44 berechneten Verlauf von $\mu(T)$ für drei unterschiedlich breite Barrierenhöhenverteilungen $P(E_B)$ (eingebettete Abb.). Bei Halleffektmessungen an den hier untersuchten poly-Si Schichten wird ein solches Verhalten der Beweglichkeit nicht beobachtet. Die Hallbeweglichkeit der bei $T_d = 50$ °C und $T_d = 300$ °C auf Corning Glas abgeschiedenen Schichten kann eindeutig durch ein aktiviertes Verhalten mit einer Aktivierungsenergie von $E_A^\mu \approx 44$ meV bzw. $E_A^\mu \approx 62$ meV beschrieben werden (Punkte in Abb. 4.11). Anzumerken ist hierbei allerdings, dass der mittels Halleffektmessungen zugängliche Temperaturbereich relativ klein ist und dass auch die Dunkelleitfähigkeit dieser Proben bei hohen Temperaturen

durch ein einfach aktiviertes Verhalten beschrieben werden kann. Für tiefe Temperaturen zeigt die Dunkelleitfähigkeit des bei $T_d = 300\text{ °C}$ deponierten poly-Si Films dagegen eine deutliche Abweichung vom Arrhenius-Verhalten (Abb. 3.9), die durchaus durch das beschriebene Abflachen der Beweglichkeit verursacht werden kann. Die Tatsache, dass der bei $T_d = 50\text{ °C}$ abgeschiedene Film dieses Abflachen nicht zeigt ist auf die starke Ladungsträgerverarmung in den Körnern dieser Schicht zurückzuführen, für die E_A^σ durch die Aktivierung von Ladungsträgern von der Fermienergie ins Valenzband und nicht von E_A^μ bestimmt wird.

In den bis jetzt vorgestellten Modellen wird das nicht-aktivierte Verhalten der Dunkelleitfähigkeit ausschließlich auf eine temperaturabhängige Änderung der (wirksamen) Barrierenhöhe E_B und somit auf die effektive Beweglichkeit zurückgeführt. Im Gegensatz zu den Schichten auf Corning Glas zeigen die poly-Si Filme auf SiN/Borofloat Glas allerdings überhaupt kein aktiviertes Verhalten der Beweglichkeit, so dass für diese Filme auch nicht von einem durch Korngrenzenbarrieren limitierten Transport ausgegangen werden kann. Nichtsdestotrotz weicht auch das Temperaturverhalten der spezifischen Leitfähigkeit dieser Filme - wenn auch nur geringfügig - von einem einfachen Arrhenius-Verhalten ab. Anhand der entsprechenden Hallergebnisse wird dabei deutlich, dass dies nicht auf die Beweglichkeit, sondern auf eine Verringerung der Aktivierungsenergie für die Ladungsträgerkonzentration E_A^n mit sinkender Temperatur zurückzuführen ist. Ein solches Verhalten deutet zusammen mit der ebenfalls beobachteten Meyer-Neldel Beziehung zwischen σ_0 und E_A^σ auf eine temperaturabhängige Verschiebung des Fermi-niveaus hin, die im folgenden Abschnitt diskutiert wird.

4.2.4 Meyer-Neldel Korrelation und Lage der Fermienergie

Im Bereich hoher Temperaturen zeigt σ_d für alle untersuchten poly-Si Schichten ein aktiviertes Temperaturverhalten. Hierbei besteht zwischen dem Vorfaktor σ_0 und der Aktivierungsenergie E_A^σ der Leitfähigkeit eine Meyer-Neldel Beziehung der Form (Abb. 3.12)

$$\sigma_0 = \sigma_{00} \exp \left(\frac{E_A^\sigma}{kT_{iso}} \right) \quad (4.45)$$

Die Meyer-Neldel Relation (MNR) wird bei einer Vielzahl von aktivierten Prozessen (z.B. Leitfähigkeit, Thermokraft, Feldeffekt und Ladungsemission aus tiefen Störstellen) in unterschiedlichen Materialien (z.B. a-Si, $\mu\text{c-Si}$ und III-V-Halbleitern) beobachtet [177], aber ihr genauer mikroskopischer Ursprung ist bis heute nicht vollständig geklärt. Für

die physikalische Interpretation der empirischen MNR existieren in der Literatur im Wesentlichen zwei Modelle, die im Folgenden vorgestellt und diskutiert werden.

Zur Beschreibung der thermisch aktivierten Leitfähigkeit in a-Si entwickelten Overhof und Thomas ein Modell, das die MNR mit der statistischen Verschiebung (statistical shift) des Fermi-niveaus in der Bandlücke verknüpft [70, 178, 179]. Für die spezifische Leitfähigkeit beim Ladungstransport oberhalb der Beweglichkeitskante E_V in einem Transportband (z.B. dem Valenzband) gilt [69]:

$$\sigma(T) = \sigma_m \exp \left(-\frac{E_V(T) - E_F(T)}{kT} \right) \quad (4.46)$$

Hierbei ist σ_m die aus der mikroskopischen Theorie stammende minimale metallische Leitfähigkeit [180] und $E_V - E_F$ der energetische Abstand zwischen dem Transport-energieniveau und der Fermienergie E_F , der im Allgemeinen temperaturabhängig ist. Die Temperaturabhängigkeit folgt zum Einen aus einer Änderung der Bandlücke ($E_V = E_V(T)$) und zum Anderen aus der statistischen Verschiebung der Fermienergie aufgrund einer im Energiebereich $2kT$ um E_F asymmetrischen Zustandsdichte ($E_F = E_F(T)$). Overhof und Thomas betrachten eine solche statistische Verschiebung der Fermienergie für den typischen Fall einer von der Bandkante zur Bandlückenmitte hin exponentiell abfallenden Zustandsdichte $N(E)$. Der sich dabei aus der Ladungsneutralitätsbedingung

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} N(E) f(E, E_F(T), T) dE = \text{const.} \quad (4.47)$$

ergebende Verlauf von $E_F(T)$ kann in einem gewissen Temperaturbereich um Raumtemperatur durch eine lineare Temperaturabhängigkeit der Form

$$E_F(T) = E_F^*(0) + \gamma_F^* T \quad (4.48)$$

angenähert werden. Setzt man diesen Verlauf von $E_F(T)$ in Gleichung 4.46 ein, so folgt für die spezifische Leitfähigkeit:

$$\sigma(T) = \underbrace{\sigma_m \exp \left(\frac{\gamma_F^*}{k} \right)}_{\sigma_0^*} \cdot \underbrace{\exp \left(-\frac{E_V - E_F^*(0)}{kT} \right)}_{\exp(-E_A^{\sigma^*}/kT)} \quad (4.49)$$

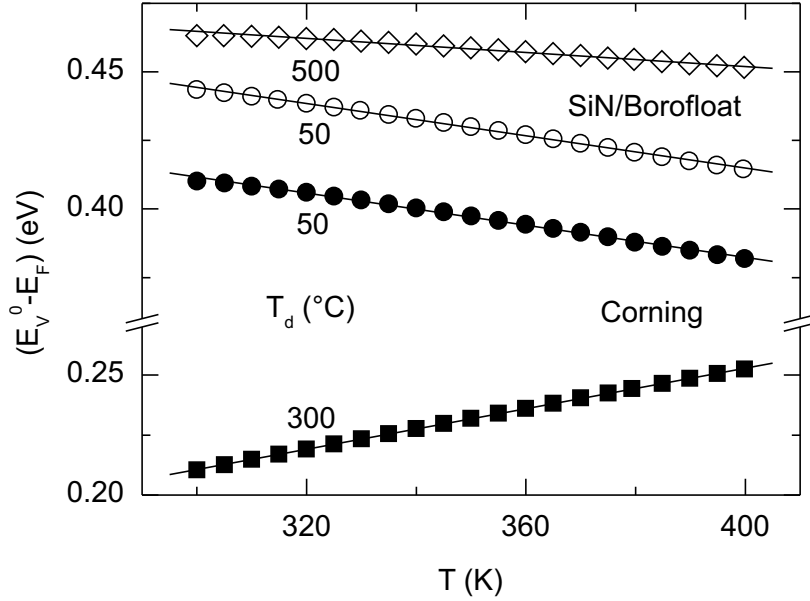


Abbildung 4.12: Position der Fermienergie E_F relativ zur Valenzbandkante in der Mitte des Kristalliten E_V^0 als Funktion der Temperatur T berechnet nach Gleichung 4.46 unter der Annahme einer mikroskopischen Leitfähigkeit von $\sigma_m = 150 (\Omega\text{cm})^{-1}$ für festphasenkristallisiertes poly-Si auf Corning Glas und SiN/Borofloat Glas, abgeschieden bei unterschiedlichen Depositionstemperaturen T_d . Die Linien sind lineare Anpassungen an den Temperaturverlauf gemäß Gleichung 4.48.

und zwischen dem exponentiellen Vorfaktor σ_0^* und der Aktivierungsenergie $E_A^{\sigma*}$ besteht eine MNR gemäß Gleichung 4.45. Aufgrund der für die Herleitung verwendeten Näherung von $E_F(T)$ (Gleichung 4.48) kann aus einer Arrhenius-Auftragung der spezifischen Leitfähigkeit dabei weder die reale Aktivierungsenergie $E_V - E_F(T)$ bzw. ihr Wert bei $T = 0 \text{ K}$ noch der mikroskopische Vorfaktor σ_m bestimmt werden. Nach diesem Modell ist das Auftreten der Meyer-Neldel Beziehung also auf eine temperaturabhängige Lage des Fermi-niveaus zurückzuführen. Unter der Annahme eines exponentiellen Vorfaktors der Leitfähigkeit von $\sigma_m = 150 (\Omega\text{cm})^{-1}$ [181] kann nach Gleichung 4.46 die Temperaturabhängigkeit des energetischen Abstands $E_V^0(T) - E_F(T)$ aus den experimentell ermittelten $\sigma_d(T)$ -Kurven bestimmt werden. Abb. 4.12 zeigt die Lage des Fermi-niveaus relativ zur Valenzbandkante in der Mitte des Kornes als Funktion der Temperatur für verschiedene poly-Si Filme auf Corning Glas bzw. SiN-beschichtetem Borofloat Glas. Für poly-Si Schichten mit großer Aktivierungsenergie, d.h. geringer Leitfähigkeit bei Raumtemperatur schiebt die Fermienergie mit zunehmender Temperatur in Richtung

Substrat	T_d (°C)	E_A^σ (eV)	σ_0 ((Ωcm) ⁻¹)	$E_V^0 - E_F^*(0)$ (eV)	γ_F^*/k	$\sigma_m \exp(\gamma_F^*/k)$ ((Ωcm) ⁻¹)
Corning	50	0.499	$4.33 \cdot 10^3$	0.499	3.39	$4.46 \cdot 10^3$
	300	0.084	$1.11 \cdot 10^0$	0.084	-4.90	$1.12 \cdot 10^0$
SiN/Borofloat	50	0.532	$4.47 \cdot 10^3$	0.532	3.42	$4.57 \cdot 10^3$
	300	0.529	$5.37 \cdot 10^3$	0.530	3.61	$5.55 \cdot 10^3$
	500	0.501	$6.16 \cdot 10^2$	0.503	1.49	$6.63 \cdot 10^2$

Tabelle 4.3: Gegenüberstellung der experimentellen Ergebnisse aus einer Arrhenius-Auftragung (E_A^σ , σ_0) und der sich nach dem Modell von Overhof und Thomas bei linearer Verschiebung von $E_F(T)$ mit dem Temperaturkoeffizienten γ_F^* ergebenden Werte $E_A^{\sigma*}$ und σ_0^* .

Bandkante. Poly-Si Filme mit geringer Aktivierungsenergie, d.h. hoher Leitfähigkeit bei Raumtemperatur (Corning Glas, $T_d \approx 300$ °C) zeigen dagegen eine entgegengesetzte Verschiebung in Richtung Bandlückenmitte. In beiden Fällen kann die Änderung der Lage des Fermi-niveaus gut durch einen linearen Temperaturverlauf gemäß Gleichung 4.48 angenähert werden. Die zugehörigen Temperaturkoeffizienten γ_F^* sowie die zu $T = 0$ K extrapolierten Werte von $E_V^0 - E_F(T)$ sind in Tabelle 4.3 zusammengefasst. Neben diesen Werten sind auch die aus entsprechenden Arrhenius-Darstellungen von σ_d bestimmten Aktivierungsenergien E_A^σ und exponentiellen Vorfaktoren σ_0 sowie die nach dem Modell von Overhof und Thomas gemäß Gleichung 4.49 berechneten theoretischen Vorfaktoren $\sigma_0^* = \sigma_m \exp(\gamma_F^*/k)$ angegeben. Die gute Übereinstimmung sowohl zwischen E_A^σ und $E_V^0 - E_F^*(0)$ als auch zwischen σ_0 und σ_0^* zeigt dabei, dass das Auftreten der MNR in den hier untersuchten festphasenkristallisierten poly-Si Filmen konsistent mit einer statistischen Verschiebung des Fermi-niveaus ist. Unter dieser Voraussetzung können aus der Richtung und der Stärke der Verschiebung (Vorzeichen und Absolutwert von γ_F^*) zusätzliche Informationen über die Zustandsdichte im Bereich $2kT$ um E_F abgeleitet werden. Aufgrund der zu erfüllenden Ladungsneutralität (Gleichung 4.47) gilt dabei grundsätzlich folgendes: Mit steigender Temperatur verschiebt die Fermi-energie immer in Richtung der geringeren Zustandsdichte und die Verschiebung ist umso ausgeprägter, je niedriger und je asymmetrischer die Zustandsdichte um E_F ist. Die experimentellen Ergebnisse aus Abb. 4.12 können demnach folgendermaßen interpretiert werden: Für poly-Si Schichten mit geringer Aktivierungsenergie (z.B. Corning, $T_D = 300$ °C) liegt E_F im Bereich der Akzeptorzustände nahe der Valenz-

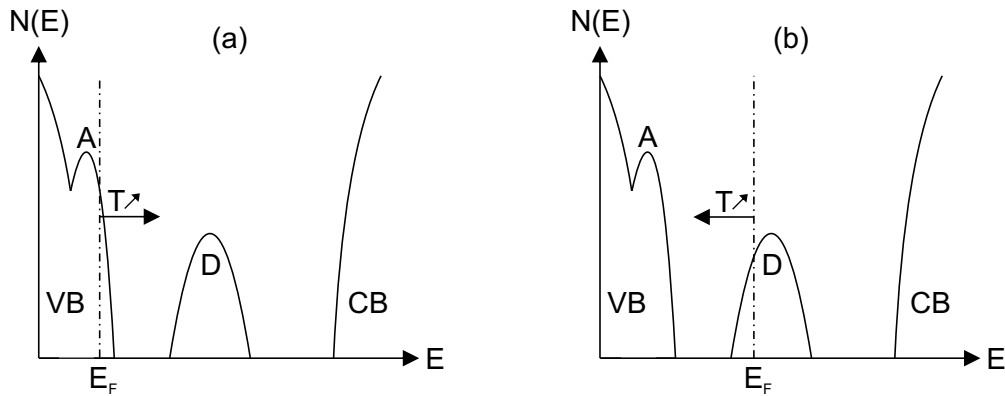


Abbildung 4.13: Zustandsdichtemodell zur Veranschaulichung der statistischen Verschiebung der Fermienergie E_F mit der Temperatur T bei (a) geringer Aktivierungsenergie und (b) hoher Aktivierungsenergie. Dargestellt sind das Valenzband (VB), das Leitungsband (CB), Akzeptorzustände an der Valenzbandkante (A) und Defektzustände in der Bandlückenmitte (D).

bandkante und schiebt aufgrund der mit zunehmendem Abstand von der Bandkante steil abfallenden Zustandsdichte stark in Richtung Bandlückenmitte (Abb. 4.13 (a)). Bei poly-Si Filmen mit hoher Aktivierungsenergie (z.B. Corning, $T_D = 50^\circ\text{C}$) liegt die Fermienergie dagegen nahe der Bandlückenmitte (Abb. 4.13 (b)) und die Verschiebung von E_F wird durch die defektbedingte Zustandsdichte in diesem Bereich bestimmt. Die beobachtete Verschiebung in Richtung Valenzbandkante ist dabei konsistent mit einer zur Bandlückenmitte hin ansteigenden Zustandsdichte. Abb. 4.13 veranschaulicht eine entsprechende Zustandsdichteverteilung innerhalb der Kristallite bestehend aus Akzeptorzuständen (A) an der Valenzbandkante und Defektzuständen (D) in der Bandlückenmitte. Der Temperaturkoeffizient ist hierbei für alle amorph abgeschiedenen und anschließend festphasenkristallisierten Schichten nahezu identisch, was auf vergleichbare Zustandsdichten in den poly-Si Filmen hindeutet. Direkt polykristallin abgeschiedene Filme zeigen dagegen eine deutlich geringere Temperaturabhängigkeit des Fermi-niveaus. Verantwortlich hierfür ist mit großer Wahrscheinlichkeit eine höhere Zustandsdichte im Bereich zwischen der Valenzbandkante und der Bandmitte aufgrund weiter ausgedehnter Valenzbandausläufer. Für diese Annahme spricht zum Einen die größere Unordnung in den direkt kristallin abgeschiedenen Schichten aufgrund der deutlich kleineren Korngrößen und zum Anderen die stärkere Absorption für Photonenenergien knapp unterhalb der Bandlückenenergie (Abb. 3.26).

Mit Hilfe des Modells von Overhof und Thomas kann die MNR für elektronische Prozesse in a-Si (und auch in den hier untersuchten poly-Si Filmen) gut erklärt werden. Allerdings existieren auch eine Reihe experimenteller Befunde, die gegen eine solche Interpretation sprechen. Erstens, wenn für das Auftreten der MNR wirklich exponentielle Zustandsdichten in der Bandlücke benötigt werden, ist es schwer nachzuvollziehen, warum sie so weit verbreitet ist. Insbesondere ist nicht zu verstehen, warum auch kristalline Materialien eine MNR zeigen [182, 183], für die eine solche Zustandsdichte definitiv nicht angenommen werden kann. Zweitens kann nicht erklärt werden, warum die MNR häufig nur für relativ große Aktivierungsenergien ($E_A \gg kT_{iso}$) beobachtet wird und für kleinere Energien nicht mehr anwendbar ist [184]. Und schließlich ist es schwer nachzuvollziehen, warum völlig unterschiedliche physikalische Phänomene im gleichen Material oder gleiche Phänomene in unterschiedlichen aber miteinander verwandten Materialien durch dieselben Meyer-Neldel Parameter bestimmt sein sollten [185].

Um diese Unzulänglichkeiten der Zustandsdichtemodelle zu beseitigen wurde von Yelon und Movaghar [72, 73] ein alternatives Modell entwickelt, das die MNR als natürliche Folge statistischer Prozesse bei Vielfachanregung über eine Energiebarriere beschreibt. Ausgangspunkt für die Betrachtungen von Yelon und Movaghar ist die theoretische Beschreibung aktivierter Prozesse in chemischen Reaktionen durch eine Reaktionsrate der Form [186]

$$\nu = \nu_{00} \exp \left(-\frac{\Delta G}{kT} \right) \quad (4.50)$$

Hierbei ist ΔG die Differenz der freien Enthalpie zwischen dem Maximum einer Aktivierungsbarriere und dem Ausgangszustand und ν_{00} eine Konstante. Aus der thermodynamischen Zustandfunktion

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (4.51)$$

mit der Enthalpiedifferenz ΔH und der Entropiedifferenz ΔS folgt dann:

$$\nu = \nu_{00} \exp \left(\frac{\Delta S}{k} \right) \cdot \exp \left(-\frac{\Delta H}{kT} \right) \quad (4.52)$$

Demnach ergibt sich eine MNR genau dann, wenn die Aktivierungsentropie proportional zur Aktivierungsenthalpie ist ($S \propto H$). Für eine geringe Aktivierungsenthalpie bzw. Aktivierungsenergie gilt eine solche Proportionalität nicht, da der Aktivierungsprozess

in diesem Fall von einer einzigen Anregung dominiert wird und die Reaktion somit isoentropisch ($\Delta S = 0$) abläuft. Ist die Aktivierungsenergie dagegen groß verglichen mit der typischen elementaren Anregung des Systems (z.B. Phonon), so kann der aktivierte Prozess nur unter Beteiligung vieler Elementaranregungen stattfinden. Da die Entropie proportional zum Logarithmus der Anzahl der möglichen Kombinationen dieser elementaren Anregungen ist, nimmt ΔS mit wachsender Barrierenhöhe ΔH zu. Die genaue Beziehung zwischen ΔS und ΔH hängt dabei von der Art der Anregung ab. Als ein Beispiel kann angenommen werden, dass die Energie zum Überwinden der Enthalpiebarriere ΔH durch die gleichzeitige Vernichtung vieler Phononen bereitgestellt wird. Geht man vom einfachen Einstein-Modell des Phononenspektrums aus, in dem jedes Quant eine Energie E_E besitzt, so müssen für den Anregungsprozess genau $n = \Delta H/E_E$ Phononen vernichtet werden. Nimmt man ferner an, dass insgesamt N Phononen innerhalb des Wechselwirkungsvolumens, aus dem sie vernichtet werden können, vorhanden sind, so gilt für die mit der Anregung über die Barriere verbundene Entropieänderung

$$\frac{\Delta S}{k} = \ln \left[\frac{N!}{n!(N-n)!} \right] \approx N \ln \left[\frac{N}{N-n} \right] + n \ln \left[\frac{N-n}{n} \right] \quad (4.53)$$

Für $n \ll N$ erhält man schließlich die erwünschte Proportionalität zwischen der Änderung der Entropie und der Enthalpie gemäß

$$\frac{\Delta S}{k} \approx n \ln \frac{N}{n} \approx \frac{\Delta H}{E_E} \ln N \quad (4.54)$$

die durch Einsetzen in 4.52 (und unter der Annahme, dass N unabhängig von ΔH ist) zu einer MNR gemäß

$$\nu = \underbrace{\nu_{00} \exp \left(\frac{\Delta H}{E_E} \ln N \right)}_{\nu_0} \cdot \underbrace{\exp \left(-\frac{\Delta H}{kT} \right)}_{\exp(-E_A/kT)} \quad (4.55)$$

führt. Nach dem Modell von Yelon und Movaghar findet die Anregung über die Energiebarriere durch Absorption vieler Phononen aus einem Phononenreservoir statt und der Meyer-Neldel Parameter kT_{iso} entspricht im Wesentlichen der Energie einer elementaren Anregung, d.h. der Energie eines Phonons. Die in dieser Arbeit experimentell bestimmten Werte des Meyer-Neldel Parameters von $kT_{iso} \approx 53$ meV für amorph abgeschiedene

bzw. $kT_{iso} \approx 60$ meV für direkt kristallin abgeschiedene poly-Si Schichten stimmen dabei gut mit der mittleren Energie optischer Phononen in c-Si von $E_E \approx 56$ meV [187] überein. Theoretisch kann also auch dieses Modell das Auftreten der MNR in den hier untersuchten poly-Si Filmen beschreiben.

4.2.5 Hopping-Transport über lokalisierte Zustände

Neben den in den vorhergehenden Abschnitten diskutierten Mechanismen zur Beschreibung des thermisch nicht aktivierten Transportverhaltens bei tiefen Temperaturen wird in der Literatur häufig auch ein Ladungstransport über lokalisierte Zustände an der Fermienergie angenommen. Dieser als Hopping-Transport bezeichnete Tunnelmechanismus wird normalerweise vorwiegend in relativ hoch dotierten kristallinen Halbleitern oder amorphen Materialien beobachtet und setzt eine hohe Zustandsdichte im Bereich der Fermienergie voraus. Im Fall polykristalliner Materialien ist insbesondere in den ungeordneten Bereichen zwischen den Kristalliten von einer entsprechend hohen Bandlückenzustandsdichte auszugehen. Ein möglicher Hopping-Transport bei tiefen Temperaturen sollte demnach also bevorzugt entlang von Korngrenzen stattfinden. Im Folgenden wird untersucht, ob ein Ladungstransport über lokalisierte Zustände entlang von Korngrenzen auch in den hier untersuchten festphasenkristallisierten poly-Si Filmen in Frage kommt. Hierzu wird zunächst das von Mott zur Beschreibung des Hopping-Transportes entwickelte Modell vorgestellt und anschließend werden die mit Hilfe dieses Modells aus den experimentellen Daten bestimmten Hopping-Parameter diskutiert.

Hopping von Ladungsträgern zwischen lokalisierten Zuständen besteht aus zwei Teilprozessen [188]. Die Ladungsträger nehmen zunächst aus dem Gitter thermische Energie auf, die dem energetischen Abstand ΔE zwischen Anfangs- und Endzustand entspricht und tunnelt im Anschluss durch die verbleibende Potentialbarriere zum nächsten Zustand (Abb. 4.14). Die Übergangsrate zwischen zwei lokalisierten Zuständen im Abstand R ist dabei gegeben durch [69]

$$\nu = \nu_0 \exp(-2\alpha_L R) \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right) \quad (4.56)$$

Hierbei ist ν_0 die Frequenz, mit der die Ladungsträger gegen die Potentialbarriere anlaufen (Phononenfrequenz) und α_L^{-1} die Lokalisationslänge, d.h. die Ausdehnung der Wellenfunktion des lokalisierten Zustands [189]. Obige Übergangsrate führt zu einem

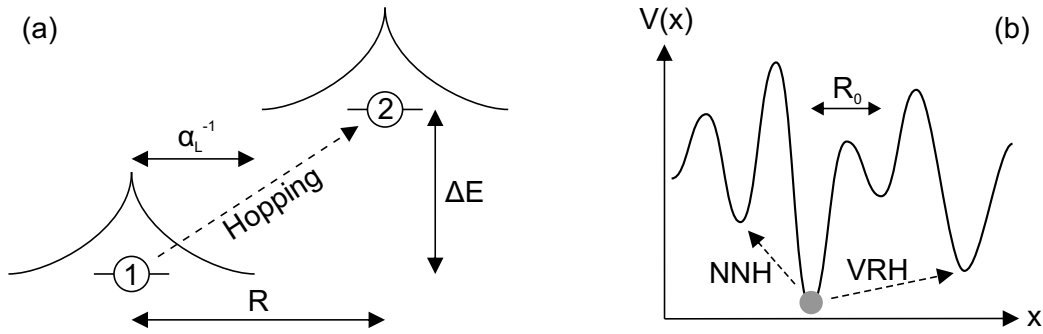


Abbildung 4.14: (a) Modell zur Veranschaulichung des Hopping-Transportes von Ladungsträgern zwischen zwei lokalisierten Zuständen (Lokalisationslänge α_L^{-1}) mit Energiedifferenz ΔE und räumlichem Abstand R . (b) Hopping zwischen nächsten Nachbarn im Abstand R_0 („nearest neighbor hopping“, NNH) bzw. zwischen Zuständen mit variablem Abstand („variable range hopping“, VRH) in einem Potential $V(x)$.

Beitrag des Hopping-Transportes zur spezifischen Leitfähigkeit gemäß [190]

$$\sigma = 2q^2 R^2 N(E_F) \nu_0 \cdot \exp(-2\alpha_L R) \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right) \quad (4.57)$$

Die Hopping-Leitfähigkeit hängt also - typisch für einen quantenmechanischen Tunnelprozess [79] - im Wesentlichen vom energetischen (ΔE) und räumlichen (R) Abstand der beteiligten Zustände ab. Abhängig von diesen beiden Parametern und der zur Verfügung stehenden thermischen Energie kann zwischen zwei verschiedenen Hopping-Mechanismen unterschieden werden. Ist der mittlere Abstand R_0 zwischen nächsten Nachbarn deutlich kleiner als die Lokalisationslänge α_L^{-1} ($\alpha_L R_0 \ll 1$), so dominiert in Gleichung 4.57 der zweite Exponentialterm und man beobachtet ein thermisch aktiviertes Verhalten der Dunkelleitfähigkeit. Dieser Fall, bei dem die Ladungsträger nur zwischen unmittelbar benachbarten Zuständen tunneln, wird als Nearest-Neighbor-Hopping (NNH) bezeichnet [188]. Für im Vergleich zur Lokalisationslänge große mittlere Abstände zwischen nächsten Nachbarn ($\alpha_L R_0 \gg 1$) dominiert in Gleichung 4.57 dagegen der erste Exponentialterm. In diesem Fall tunneln die Ladungsträger nicht in benachbarte Zustände, sondern in weiter entfernte Zustände mit geringerer Energiedifferenz. Dieser Mechanismus wird als Variable-Range-Hopping (VRH) bezeichnet und findet vorwiegend bei tiefen Temperaturen in einem schmalen Energiebereich um die Fermienergie statt. Die Hopping-Leitfähigkeit wird dabei durch die Tunnelprozesse bestimmt, die zu einem minimalen Exponenten in Gleichung 4.57 führen. Unter der

vereinfachten Annahme einer um die Fermienergie konstanten Zustandsdichte ergibt sich aus der Minimierung dieses Exponenten (Gesetz von Mott [191])

$$\sigma(T) = \sigma_h \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right] , \quad T_0 = \frac{16\alpha_L^3}{kN(E_F)} \quad (4.58)$$

Hierbei ist $N(E_F)$ die Zustandsdichte an der Fermienergie und σ_h der mikroskopische Vorfaktor der Hopping-Leitfähigkeit, der in der Größenordnung der minimalen metallischen Leitfähigkeit liegt [192]. Für die mittlere Hopping-Distanz $\bar{R}$ sowie die Energiedifferenz der am Tunnelprozess beteiligten Zustände ΔE gilt dabei [193]

$$\bar{R} = \left(\frac{9}{8\pi\alpha_L kTN(E_F)} \right)^{1/4} \quad (4.59)$$

$$\Delta E = \left(\frac{3}{4\pi R^3 N(E_F)} \right) \quad (4.60)$$

Von den in dieser Arbeit untersuchten Proben zeigen nur die bei $T_d = 100^\circ\text{C}$, $T_d = 150^\circ\text{C}$ und $T_d = 200^\circ\text{C}$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Filme ein entsprechendes Temperaturverhalten der Leitfähigkeit bei tiefen Temperaturen. In Abb. 4.15 ist exemplarisch die Dunkelleitfähigkeit der bei $T_d = 150^\circ\text{C}$ auf Corning Glas abgeschiedenen poly-Si Schicht als Funktion von $T^{-1/4}$ dargestellt. Für diese Probe kann σ_d über einen großen Temperaturbereich von $50\text{ K} \leq T \leq 175\text{ K}$ hervorragend durch Gleichung 4.58 mit den in der Abbildung angegebenen Parametern beschrieben werden (gestrichelte Linie in Abb. 4.15). Der Wert des Parameters T_0 stimmt hierbei sehr gut mit den für Hopping-Transport in a-Si [194,195] bzw. $\mu\text{c-Si}$ [196] beobachteten Werten überein. Für den exponentiellen Vorfaktor finden sich in der Literatur dagegen sehr unterschiedliche Werte, die z.T. um viele Größenordnungen variieren und zudem deutlich vom theoretisch erwarteten Wert (minimale metallische Leitfähigkeit σ_m [192]) abweichen. Zusätzlich wird häufig eine mit der Meyer-Neldel Relation beim aktivierten Transport vergleichbare exponentielle Abhängigkeit des Vorfaktors von T_0 beobachtet. Dieses Verhalten kann u.a. auf einen Hopping-Transport über lokalisierte Zustände in einer um E_F exponentiell variierenden Zustandsdichteverteilung wie z.B. innerhalb der Bandausläufer amorpher Halbleiter, zurückgeführt werden [197]. Ein Temperaturverhalten der Leitfähigkeit gemäß Gleichung 4.58 ist zwar eine notwendige, aber keinesfalls eine hinreichende Bedingung für die Anwendbarkeit der VRH-Theorie. Hierfür müssen ferner auch die

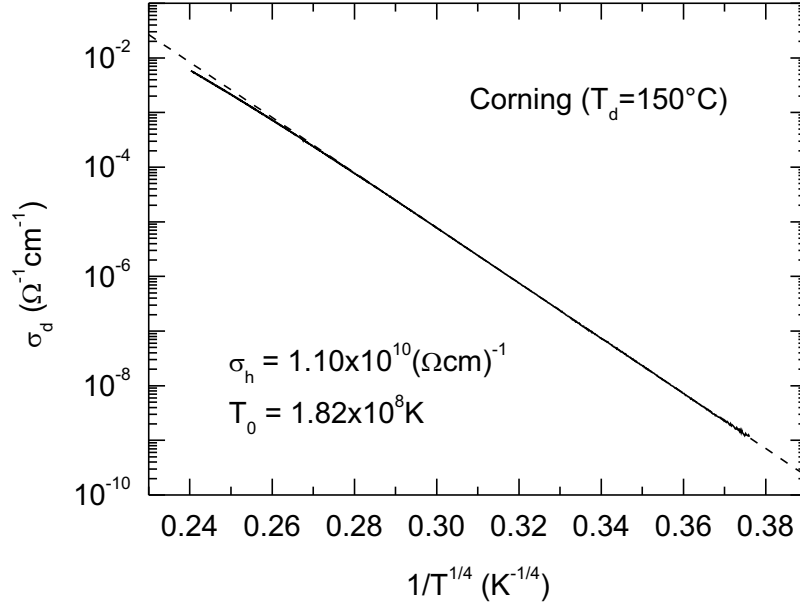


Abbildung 4.15: Dunkelleitfähigkeit σ_d des bei $T_d = 150^\circ\text{C}$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Films als Funktion von $T^{-1/4}$. Die gestrichelte Gerade ist eine Anpassung gemäß Gleichung 4.58 mit den in der Abbildung angegebenen Parametern.

entsprechenden Hopping-Parameter ($N(E_F)$, $\bar{R}$ und ΔE) physikalisch sinnvolle Werte liefern und die vom Modell geforderten Voraussetzungen erfüllen. Zum Einen darf die mittlere Hopping-Energie nicht kleiner als die thermische Energie sein ($\Delta E > kT$) und zum Anderen muss die Schichtdicke deutlich größer als die mittlere Hopping-Distanz sein ($d \gg \bar{R}$). Unter der Annahme einer für lokalisierte Zustände in Silizium typischen Lokalisationslänge von $\alpha_L^{-1} = 10 \text{ \AA}$ [191, 198, 199] erhält man für die bei $T_d = 150^\circ\text{C}$ abgeschiedene poly-Si Schicht ($T = 100 \text{ K}$): $N(E_F) \approx 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$, $\bar{R} \approx 14 \text{ nm}$ und $\Delta E \approx 82 \text{ meV}$. Diese Hopping-Parameter erfüllen beide Bedingungen. Die ermittelte Zustandsdichte an der Fermienergie ist zudem konsistent sowohl mit theoretischen Berechnungen von Godet (Lokalisationsparameter $N(E_F)\alpha_L^{-3} \approx 1 \cdot 10^{-3} \text{ eV}^{-1}$) [197] als auch mit experimentell bestimmten Zustandsdichten in a-Si bzw. $\mu\text{c-Si}$ [194, 196]. Demnach ist auch Hopping-Transport als Ursache für die zu tiefen Temperaturen hin gekrümmten $\sigma(T^{-1})$ -Kurven nicht auszuschließen. Hierbei ist allerdings anzumerken, dass die aus den experimentellen Daten bestimmte Zustandsdichte stark von der angenommenen Lokalisationslänge abhängt ($N(E_F) \propto \alpha_L^3$) und somit nur als grobe Abschätzung angesehen werden kann.

4.2.6 Wasserstoffbedingte Änderung der Transporteigenschaften

Zur Verbesserung der elektrischen und optoelektrischen Eigenschaften polykristalliner Siliziumschichten werden diese typischerweise einer Nachbehandlung mit atomarem Wasserstoff unterzogen. Bei diesem als „Wasserstoffpassivierung“ bezeichneten Prozess wird im Wesentlichen die besondere Eigenschaft von Wasserstoff ausgenutzt, mit einer Vielzahl elektrisch aktiver Defekte in Si Komplexe bilden zu können, wodurch entsprechende Zustände in der Bandlücke eliminiert werden [125]. Häufig wird in diesem Zusammenhang allerdings nur ein einziger Defekt, nämlich das Si Dangling-Bond, betrachtet, dessen Konzentrationsabnahme sich mittels der Methode der Elektronenspinresonanz gut beobachten lässt. Neben dieser Passivierung von Dangling-Bond Defekten beeinflusst Wasserstoff die elektrischen Eigenschaften von Silizium aber auch durch eine Vielzahl weiterer Prozesse wie z.B. die Neutralisation vorhandener Dotanden, die Bildung aktiver Donator- bzw. Akzeptorzustände oder die Erzeugung neuer zusätzlicher Defekte. Auch das Passivierungsverhalten der hier untersuchten festphasenkristallisierten poly-Si Filme kann nicht ausschließlich mit einer Reduktion der Dangling-Bond Konzentration interpretiert werden. Im Folgenden werden deshalb zunächst die aus der Literatur bekannten und für den elektrischen Transport relevanten Eigenschaften von Wasserstoff in Silizium vorgestellt und im Anschluss mit den experimentellen Ergebnissen korreliert.

Isolierter interstitieller Wasserstoff in Silizium hat einen amphoterischen Charakter, kann demnach abhängig von der Besetzung einen neutralen (H^0), positiven (H^+) oder negativen (H^-) Ladungszustand annehmen. Der Ladungszustand bestimmt hierbei u.a. die Bindungskonfiguration von Wasserstoff im Si-Netzwerk. Im positiven bzw. neutralen Zustand befindet sich der Wasserstoff aufgrund der in diesem Bereich maximalen Elektronenzustandsdichte im Bindungsmittelpunkt zwischen zwei Si-Atomen („bond-center site“, BC) und bildet mit diesen eine 3-Zentren-Bindung (Abb. 4.16 (a)). Sowohl dichtefunktionaltheoretische (DFT) Berechnungen [200] als auch experimentelle Untersuchungen [201, 202] zeigen dabei, dass diese Konfiguration zu einem Donatorniveau bei $E_C - E_D \approx 0.2$ eV führt. Im negativen Ladungszustand bevorzugt Wasserstoff dagegen Bereiche niedriger Elektronenzustandsdichte und befindet sich deshalb auf einem interstitiellen Tetraederplatz („tetrahedral interstitial site“, T_d) (Abb. 4.16 (b)). Mit dieser Konfiguration ist ein Akzeptorniveau bei $E_C - E_A \approx 0.6$ eV verknüpft [200, 203].

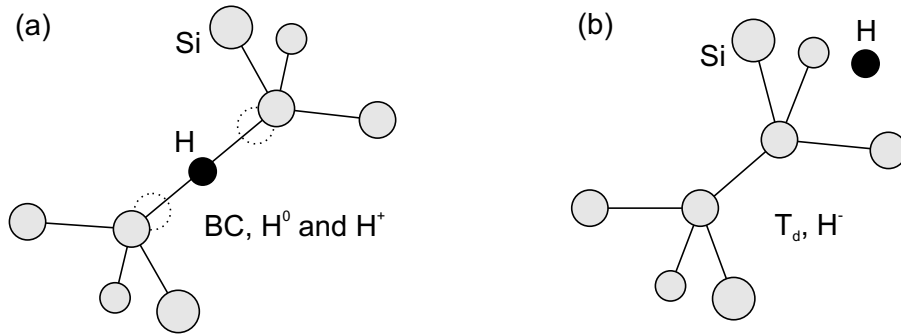


Abbildung 4.16: Mögliche Bindungskonfigurationen von isoliertem Wasserstoff in Silizium [200]. (a) H im Bindungsmittelpunkt zwischen zwei Si-Atomen („bond-center site“, BC) und (b) H auf einem interstitiellen Tetraederplatz („tetrahedral interstitial site“, T_d).

Die Stabilität der einzelnen Ladungszustände hängt von ihrer Besetzung und somit von der Lage der Fermienergie ab. Abb. 4.17 zeigt die mittels DFT in der lokalen Dichtenäherung („local density approximation“, LDA) berechneten Bildungsenergien von H⁻, H⁰ und H⁺ in Si als Funktion der Fermienergie [204]. Die Bildungsenergie entspricht hierbei der Energie, die benötigt wird, um ein Wasserstoffatom im entsprechenden Ladungszustand in das Wirtsmaterial einzubauen. Für $E_F - E_V < 0.8$ eV ist H⁺ der stabilste Ladungszustand und für $E_F - E_V > 0.8$ eV ist H⁻ am stabilsten. Die Bildungsenergie für den neutralen Zustand (H⁰) hängt dagegen nicht von E_F ab und ist stets größer als für H⁺ bzw. H⁻. Diese Eigenschaft führt dazu, dass das Donatorniveau $E_D = \epsilon(+/0)$ energetisch über dem Akzeptorniveau $E_A = \epsilon(0/-)$ liegt, was typisch für ein Defektzentrum mit negativer Korrelationsenergie $U = E_A - E_D$ ist. Die aus den theoretischen Berechnungen bestimmten Umladungsniveaus werden auch experimentell bestätigt [200, 203]. Wasserstoff ist demnach selbst ein aktiver Dotand in Si (Donator in p-typ Si und Akzeptor in n-typ Si) und wirkt der nominellen Dotierung entgegen. Im Fall der hier untersuchten Bor-dotierten poly-Si Schichten liegt der Wasserstoff dabei im Wesentlichen als H⁺ vor und fungiert somit als kompensierender Donator.

Zusätzlich zu dieser indirekten Kompensation aufgrund seiner Dotiereigenschaften kann Wasserstoff vorhandene Dotanden auch direkt neutralisieren [205–207]. Bei diesem Prozess werden geladene Wasserstoffatome aufgrund der Coulombanziehung von ionisierten Dotieratomen mit entgegengesetzter Ladung eingefangen und bilden mit diesen elektrisch inaktive Komplexe. Für die zur Dotierung von Si am häufigsten verwendeten

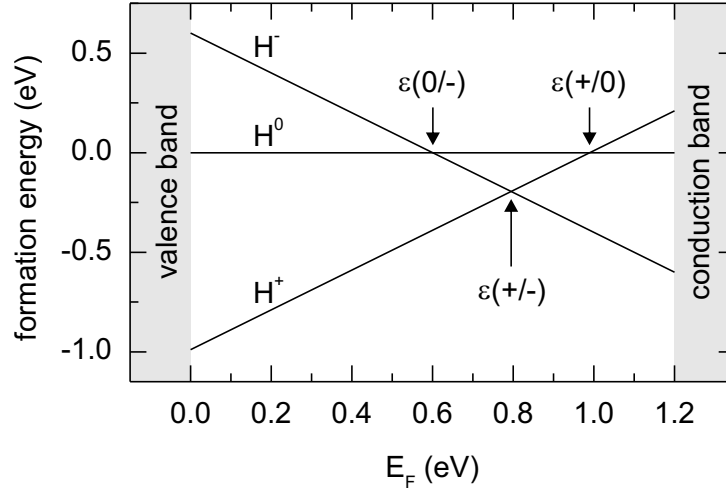


Abbildung 4.17: Bildungsenergien von H^- , H^0 und H^+ in Si als Funktion der Fermienergie E_F nach DFT-LDA-Rechnungen [204].

Elemente B und P kann dieser Mechanismus durch die Reaktionen



beschrieben werden. Die Neutralisation von Dotieratomen durch Komplexbildung mit geladenen Wasserstoffatomen ist dabei eine direkte Folge der zuvor beschriebenen Kompensationseigenschaft von Wasserstoff [204]: Zunächst rekombinieren die von den Wasserstoffatomen abgegebenen Minoritätsladungsträger mit vorhandenen Majoritätsladungsträgern (Kompensation) und anschließend binden sich die mobilen geladenen Wasserstoffatome an ionisierte Dotieratome (Neutralisation). Im Allgemeinen ist die Passivierung von Akzeptoren dabei stärker ausgeprägt als die von Donatoren [207]. Ursache hierfür ist die bei gleicher Dotierung höhere Konzentration von H^+ in p-typ Si im Vergleich zu H^- in n-typ Si aufgrund der in Relation zur Bandlückenmitte asymmetrischen Lage des Umladungsniveaus $\epsilon(+/-)$ [200] (Abb. 4.17).

Analog zur gerade beschriebenen Neutralisation flacher Donator- bzw. Akzeptorzustände passiviert Wasserstoff auch tiefe Defektzentren. Die wasserstoffbedingte Verbesserung der elektronischen Qualität von a-Si und poly-Si beruht dabei in erster Linie auf der Passivierung von Si Dangling-Bonds, die den wesentlichen (intrinsischen) Defekt in diesen Materialien darstellen. Wasserstoff sättigt allerdings nicht nur vorhandene Dangling-Bonds ab, sondern kann durch Aufbrechen verspannter Si-Si Bindungen auch

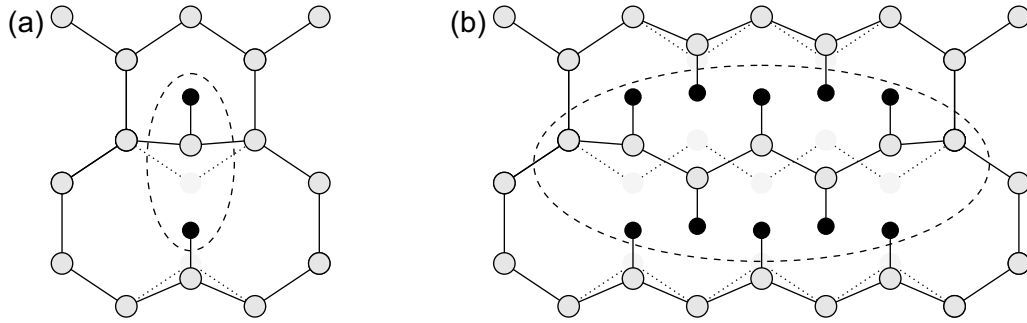
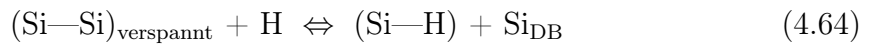
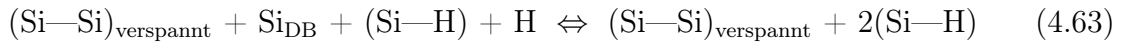


Abbildung 4.18: (a) Molekularer Wasserstoffkomplex H_2^* bestehend aus einem Wasserstoffatom in der BC-Position und einem weiteren Wasserstoffatom in der T_d -Position [208]. (b) Aus mehreren H_2^* -Komplexen aufgebauter ausgedehnter Defekt (Platelet) [209].

selbst neue Dangling-Bonds erzeugen. Die Vernichtung und Generation von Dangling-Bond Defekten lässt sich durch folgende Reaktionen zusammenfassen [104]:



Unter gegebenen experimentellen Bedingungen (definiertes chemisches Potential von Wasserstoff im Plasma und in der Probe) stellt sich während der Wasserstoffbehandlung ein Gleichgewichtszustand zwischen Defektpassivierung und Defektgeneration ein, der beim anschließenden schnellen Abkühlen eingefroren wird.

In vielen Fällen übersteigt die Wasserstoffkonzentration in poly-Si (typischerweise $\approx 10^{21} \text{ cm}^{-3}$) allerdings sowohl die Konzentration an Dangling-Bonds ($< 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) als auch die Dotierkonzentration um ein Vielfaches. Folglich ist ein Großteil des Wasserstoffs in poly-Si weder an Si Dangling-Bonds noch in Komplexen mit Dotieratomen gebunden. Weitere mögliche Konfiguration von Wasserstoff in Silizium sind zum Einen interstitielle Wasserstoffmoleküle (H_2) und zum Anderen molekulare Wasserstoffkomplexe (H_2^*). Letztere bestehen aus je einem Wasserstoffatom in der BC-Position und einem weiteren Wasserstoffatom in der gegenüberliegenden T_d -Position [208] (Abb. 4.18 (a)). Theoretische Berechnungen ergeben für beide Konfigurationen relativ niedrige Bildungsenergien [210] und lassen daher vermuten, dass ein Großteil des Wasserstoffs in Silizium in Form von H_2 [211] bzw. H_2^* vorliegt. Die H_2^* -Struktur kann ferner als

Grundbaustein einer als Platelet bekannten [122, 133] ausgedehnten Defektstruktur aufgefasst werden (Abb. 4.18 (b)) [209, 212]. Zuerst beobachtet und untersucht wurden diese Platelet-Strukturen in einkristallinem Silizium [122]. Dort existieren sie nur in n-dotiertem Material, sind auf einen relativ schmalen Bereich um $\approx 0.1 \mu\text{m}$ unter der Probenoberfläche begrenzt, vorzugsweise entlang von $\{111\}$ -Ebenen orientiert und treten vorwiegend in Regionen mit hoher Wasserstoffkonzentration ($> 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) bei Passivierungstemperaturen $T_H < 300 \text{ }^\circ\text{C}$ auf [213]. Entscheidend für den elektrischen Transport sind aber in erster Linie die mit diesen Strukturen verbundenen akzeptorartigen Zustände etwa 0.06 eV und 0.51 eV unterhalb der Leitungsbandkante [122]. Nickel *et al.* zeigten später, dass Platelets auch in poly-Si entstehen [133] und lieferten gleichzeitig ein Modell zur Beschreibung der starken Abhängigkeit ihrer Bildung von der Fermienergie [214]: Wie bereits erwähnt können H_2^* -Komplexe als Grundbausteine für die Bildung von Platelets aufgefasst werden. Da der H_2^* -Komplex seinerseits aus einem H^+ in der BC- und einem H^- in der T_d -Position besteht (Abb. 4.18), wird für seine Entstehung Wasserstoff in beiden Ladungszuständen benötigt. Diese Voraussetzung ist genau dann gegeben, wenn das Fermi-niveau in der Nähe des Umladungsniveaus $\epsilon(+/-)$ liegt (Abb. 4.17). Für poly-Si kann dies aufgrund der Bandverbiegung z.B. in einem bestimmten Abstand von der Korngrenze der Fall sein [214].

Zusätzlich zu den gerade diskutierten intrinsischen Defekten enthalten poly-Si Schichten häufig auch eine Reihe extrinsischer Verunreinigungen, die ebenfalls durch eine Wasserstoffbehandlung elektrisch passiviert bzw. aktiviert werden können. Aufgrund der Vielzahl möglicher Kontaminationen wird an dieser Stelle exemplarisch nur auf Sauerstoff als transportrelevante und häufig unvermeidliche Verunreinigung eingegangen. In seiner gewöhnlichen interstitiellen Konfiguration ist Sauerstoff in Si elektrisch inaktiv. Die thermische Behandlung von sauerstoffreichem Si ($[\text{O}_\text{i}] > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) im Temperaturbereich $300 \text{ }^\circ\text{C} \leq T \leq 550 \text{ }^\circ\text{C}$ führt allerdings zur Bildung elektrisch aktiver Sauerstoffzentren, die als thermische Donatoren („thermal donors“, TD) bezeichnet werden [215]. Ihre Konzentration hängt sowohl von der Heizdauer als auch von der Temperatur ab und ist proportional zu $[\text{O}_\text{i}]^3$ [216]. Die zugehörigen Energieniveaus der Doppeldonatoren liegen bei $E_C - E_F \approx 60\text{-}70 \text{ meV}$ bzw. $E_C - E_F \approx 130\text{-}150 \text{ meV}$ [217, 218] und verschieben mit zunehmender Heizdauer in Richtung Leitungsbandkante [217]. Genauere Untersuchungen identifizieren TD als Sauerstoffkomplexe, deren Größe mit der Temperatur zunimmt [219]. Die Bildung TD wird durch Temperung ($250 \text{ }^\circ\text{C} \leq T_H \leq 450 \text{ }^\circ\text{C}$) in einer atomaren Wasserstoffatmosphäre stark verstärkt [220]. Die größte Verstärkung

um etwa einen Faktor 300 wird dabei für Temperaturen um $T_H \approx 350^\circ\text{C}$ beobachtet [221]. Als Ursache für dieses Verhalten wird eine wasserstoffbedingte beschleunigte Diffusion von Sauerstoff in Silizium verantwortlich gemacht [222, 223].

Das Passivierungsverhalten der in dieser Arbeit untersuchten poly-Si Filme ist, abhängig von der Depositionstemperatur des amorphen Ausgangsmaterials und vom verwendeten Substrat, sehr unterschiedlich und ändert sich zudem mit der Passivierungsdauer. Ein solches Verhalten lässt sich nur mit dem gleichzeitigen Einfluss mehrerer der zuvor vorgestellten wasserstoffbedingten Prozesse erklären und macht eine eindeutige Interpretation der experimentellen Daten äußerst schwierig. Die bei $T_d = 50^\circ\text{C}$ und $T_d = 300^\circ\text{C}$ auf Corning Glas abgeschiedenen poly-Si Filme zeigen zu Beginn der Wasserstoffbehandlung sowohl eine Abnahme der Ladungsträgerkonzentration als auch der Beweglichkeit mit zunehmender Passivierungsdauer. Im Fall von c-Si ist eine solche gleichzeitige Abnahme von n und μ charakteristisch für die Entstehung kompensierender Donatoren und die dadurch bedingte Zunahme der Anzahl ionisierter Streuzentren. Die ebenfalls diskutierte Neutralisation von Boratomen durch Bildung von Bor-Wasserstoff-Komplexen würde dagegen zu einer Abnahme ionisierter Streuzentren und somit zu einem gegensätzlichen Verhalten von n und μ , d.h. einem Anstieg der Beweglichkeit bei gleichzeitiger Abnahme der Ladungsträgerkonzentration, führen. Für poly-Si ist eine solche Interpretation nicht mehr uneingeschränkt möglich, da die Beweglichkeit im Fall eines barrierenlimitierten Transportes nicht mehr durch die Streuung an ionisierten Störstellen, sondern durch die Potentialbarrieren an den Korngrenzen bestimmt wird. Eine Reduktion der effektiven Akzeptorkonzentration innerhalb der Kristallite führt in diesem Fall unabhängig vom zugrunde liegenden Mechanismus (Kompensation oder Neutralisation) zu einer Verringerung (vollständige Verarmung, $N < N^*$) oder zu einer Vergrößerung (teilweise Verarmung, $N > N^*$) der Barrierenhöhe (Abb. 4.8) und somit zu einer Zu- bzw. Abnahme der Beweglichkeit. Aufgrund der ebenfalls beobachteten Abnahme der Spindichte (Abb. 3.29) muss ferner von einer gleichzeitig stattfindenden Passivierung von Dangling-Bonds sowohl in den Körnern als auch an den Korngrenzen ausgegangen werden. Eine entsprechende Abschätzung nach dem Baccarani-Modell zeigt dabei, dass eine Reduktion der Korngrenzendefektdichte von $N_t = 3.7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ auf $N_t = 5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ im Wesentlichen nur die Barrierenhöhe der teilweise verarmten poly-Si Schicht (Corning Glas, $T_d = 300^\circ\text{C}$) verringert, aber nahezu keinen Einfluss auf die Ladungsträgerkonzentration sowie die Transportgrößen der vollständig verarmten Schicht (Corning Glas, $T_d = 50^\circ\text{C}$) hat. Die Passivierung von

Korngrenzendefekten liefert demnach nur eine mögliche Erklärung für den bei langen Passivierungszeiten beobachteten Anstieg der Beweglichkeit in der bei $T_d = 300\text{ °C}$ auf Corning Glas deponierten poly-Si Schicht. Der Wechsel des Leitungstyps für den bei $T_d = 50\text{ °C}$ abgeschiedenen poly-Si Film ist konsistent mit einer leichten Verschiebung der Fermienergie um die Bandlückenmitte. Für kurze Passivierungszeiten verschiebt E_F dabei zunächst geringfügig in Richtung Leitungsbandkante und zu langen Passivierungszeiten dann wieder in Richtung Valenzbandkante. Dieses gegensätzliche Verhalten verdeutlicht, dass das Passivierungsverhalten durch mehrere Mechanismen beeinflusst werden muss. Die anfängliche Abnahme von n kann z.B. durch eine Passivierung von Boratomen oder zusätzliche wasserstoffinduzierte Defekte bedingt sein. Für Letzteres spricht zum Einen die wasserstoffbedingte Zunahme der Defektabsorption (Abb. 3.39 und Abb. 3.40) und zum Anderen die Intensitätszunahme der mit Platelets verbundenen lokalen Vibrationsmode geklusterter (Si-D)_x-Bindungen (Abb. 3.41). Der Anstieg der Löcherkonzentration zu langen Passivierungszeiten kann dagegen z.B. auf die Passivierung von Defekten innerhalb der Körner zurückgeführt werden. Poly-Si Filme auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas zeigen über den gesamten Passivierungszeitbereich einen deutlichen Anstieg der freien Ladungsträgerkonzentration um etwa 3 Größenordnungen. Im Fall eines durch Korngrenzenbarrieren limitierten Transportes ist ein solches Verhalten typisch für die Passivierung von Korngrenzendefekten durch Wasserstoff. Die experimentellen Ergebnisse und die Diskussion im Abschnitt 4.2.1 haben allerdings gezeigt, dass der Ladungstransport in diesen Filmen nicht barrierenlimitiert ist und dass auch die vollständige Ladungsträgerverarmung in den Schichten im Rahmen des Baccarani-Modells nicht erklärt werden kann. Eine mögliche Ursache für die geringe Konzentration freier Ladungsträger ist eine hohe Defektkonzentration innerhalb der Kristallite, die zu einer Kompensation bzw. Neutralisation der Akzeptoren führt. Der starke Anstieg von n während der Wasserstoffpassivierung muss unter dieser Annahme mit einer Passivierung der entsprechenden Defekte in den Körnern gedeutet werden. Betrachtet man die bei hohen Temperaturen bestimmte Aktivierungsenergie und die Temperaturabhängigkeit der spezifischen Leitfähigkeit in Abhängigkeit von der Passivierungsdauer (Abb. 3.36, Abb. 3.34 und Abb. 3.35), so fällt auf, dass die Krümmung der $\sigma(T^{-1})$ -Kurven mit Annäherung von E_F an die Valenzbandkante zunimmt. Wie im Abschnitt 4.2.5 gezeigt wurde, kann die Abweichung von einem reinen Arrhenius-Verhalten u.a. mit einem bei tiefen Temperaturen dominierenden Hopping-Transport über lokalisierte Zustände interpretiert werden. Die mit kleiner werdendem Abstand

$E_V - E_F$ stärker ausgeprägte Krümmung und zunehmende Dunkelleitfähigkeit deutet in diesem Zusammenhang auf eine verstärkte Hopping-Leitung bei Annäherung der Fermienergie an die Valenzbandkante hin. Dieses Verhalten ist konsistent mit einer zur Valenzbandkante hin ansteigenden Zustandsdichte und kann mit Hopping-Transport über Bandausläuferzustände interpretiert werden. Zusammenfassend muss an dieser Stelle allerdings festgestellt werden, dass eine eindeutige Identifikation der während der Passivierung stattfindenden mikroskopischen Prozesse zum Einen wegen der Vielzahl möglicher Mechanismen und zum Anderen aufgrund unzureichender Informationen über extrinsische Defekte im untersuchten Material nicht möglich ist.

4.2.7 Einfluss von Substrat und Depositionstemperatur

Die experimentellen Ergebnisse zeigen, dass sowohl das verwendete Substrat als auch die Depositionstemperatur einen entscheidenden Einfluss auf die elektrischen Transporteigenschaften der festphasenkristallisierten poly-Si Filme haben. In diesem Abschnitt werden mögliche Ursachen hierfür diskutiert.

Bandverbiegung an der Grenzfläche zum Substrat

Geladene Oberflächenzustände im Si an der Substrat-Grenzfläche (Q_g) sowie ortsfeste Ladungen im Substrat (Q_f) führen zu einer Bandverbiegung in der angrenzenden Si-Schicht. Ähnlich der Bandverbiegung an den Korngrenzen hat diese entweder eine Ladungsträgerverarmung oder die Ausbildung eines Inversionsgebietes in der Si-Schicht zur Folge [74]. Um den beobachteten großen Unterschied im Transportverhalten in den poly-Si Filmen auf SiN/Borofloat Glas und Corning Glas auf eine solche Bandverbiegung zurückführen zu können, müssen sich die elektronischen Eigenschaften der beiden als Substrat dienenden Dielektrika (SiO_x und SiN_x) deutlich unterscheiden. Wie entsprechende Untersuchungen zeigen, trifft dies insbesondere auf die ortsfeste Ladung Q_f in diesen beiden Materialien zu. Die in Realität räumlich verteilte Ladung im Dielektrikum wird hierbei typischerweise durch eine effektive Flächenladung beschrieben, die zu einer identischen Feldverteilung im angrenzenden Si führt. Für SiO_x auf Si liegt die typische Flächenkonzentration ortsfester (meist positiver) Ladungen bei $Q_f \approx 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ [224, 225]. Da in diesem Fall nur eine geringe Ladung durch die Raumladungszone im angrenzenden Si kompensiert werden muss, ist die Bandverbiegung relativ gering (Abb. 4.19 (a)) und der Einfluss auf die elektrischen Eigenschaften

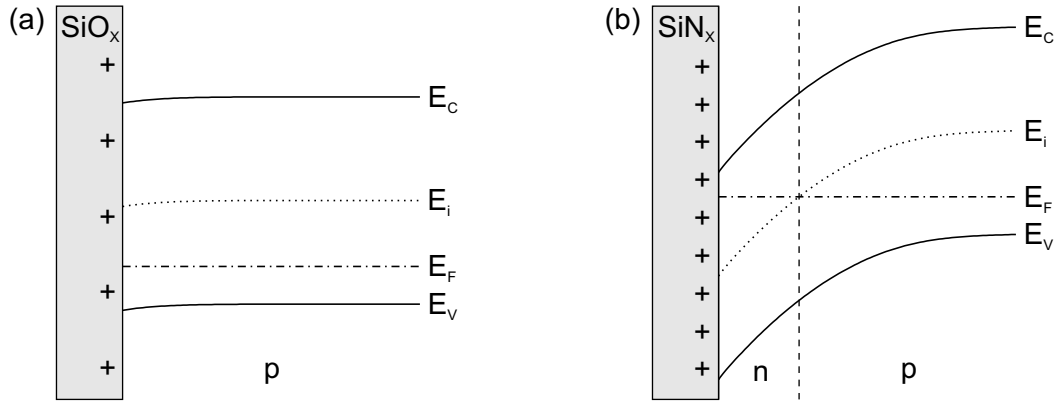


Abbildung 4.19: Schematischer Bandverlauf an der Grenzfläche zwischen Si und (a) SiO_x bzw. (b) SiN_x mit ortsfesten Ladungen (+) im Isolator.

der Schicht weitestgehend vernachlässigbar. Für mittels PECVD auf Si abgeschiedenes SiN_x wird dagegen typischerweise eine deutlich höhere Konzentration ausschließlich positiver Ladungen im Bereich $Q_f \approx 5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ beobachtet [225–227] und folglich existiert dort eine deutlich stärkere Bandverbiegung (Abb. 4.19 (b)). Diese besondere Eigenschaft von SiN wird u.a. auch bei der sogenannten Feldeffektpassivierung von Halbleiteroberflächen in elektronischen Bauelementen ausgenutzt [228–230]. Für den Vergleich mit den in dieser Arbeit untersuchten Proben ist allerdings zu erwähnen, dass die zuvor genannten Ladungsdichten an nachträglich auf einkristallinem Silizium gewachsenen bzw. abgeschiedenen SiO_x- und SiN_x-Schichten bestimmt wurden. Nichtsdestotrotz legt der große Unterschied in der Ladungsdichte für SiO_x und SiN_x nahe, dass auch das stark abweichende Transportverhalten in den hier untersuchten poly-Si Filmen auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas durch eine hohe Konzentration ortsfester Ladungen im SiN und die damit verbundene Bandverbiegung bedingt sein könnte. Aufgrund der Elektronenstrahlabscheidung der Si-Schichten auf die Dielektrika besteht ferner die Möglichkeit, dass die Konzentration dieser Ladungen während der Deposition z.B. durch hochenergetische Strahlung [231] und/oder Elektronen [232] verändert wird und somit auch von den Depositionsparametern der a-Si Ausgangsschichten abhängt.

Wasserstoffdiffusion aus dem amorphen Siliziumnitrid

Das mittels PECVD abgeschiedene a-SiN_x:H besitzt eine sehr hohe Wasserstoffkonzentration von typischerweise $[H] \approx 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ [233, 234] und dient deshalb neben seiner Funktion als Diffusionsbarriere und Antireflexionsschicht häufig auch zur Passivierung

von multikristallinem Silizium (mc-Si) [235, 236]. Eine kurzzeitige Temperung des SiN-beschichteten Siliziums bei Temperaturen $T \geq 600\text{ °C}$ führt dabei zu einer deutlichen Verbesserung der elektronischen Materialeigenschaften, die der Passivierung von Defekten im mc-Si durch Wasserstoff aus dem SiN zugeschrieben wird [237]. Die dafür nötige Diffusion von Wasserstoff aus dem SiN in das Si wurde lange Zeit kontrovers diskutiert [238, 239], da aufgrund der zu geringen Konzentration ($[H] \leq 10^{15}\text{ cm}^{-3}$) kein direkter Nachweis des zusätzlichen Wasserstoffs in c- bzw. mc-Si möglich war. Neuere Untersuchungen zeigen jedoch eindeutig, dass eine solche Wasserstoffdiffusion stattfindet und bestätigen somit die Volumenpassivierungseigenschaften des SiN [240–242]. Informationen über die Konzentration eindiffundierter Wasserstoffatome erhält man z.B. aus H-Diffusionsexperimenten an Pt-dotiertem c-Si [240, 241, 243]. Platin dient in diesem Fall als Haftstelle für den mobilen Wasserstoff, der über die sich bildenden Pt–H Komplexe indirekt mittels Infrarotspektroskopie nachgewiesen werden kann. Entsprechende Untersuchungen nach einer Diffusion bei $T = 600\text{ °C}$ für $t = 10\text{ min}$ bzw. bei $T = 750\text{ °C}$ für $t = 1\text{ min}$ ergeben eine relativ geringe Wasserstoffkonzentration (eigentlich Pt–H Konzentration) zwischen $[H] \approx 1 \cdot 10^{13}\text{ cm}^{-3}$ und $[H] \approx 1 \cdot 10^{15}\text{ cm}^{-3}$, die zudem stark von den Depositionsparametern des a-SiN_x:H sowie den Temperbedingungen abhängt. Sheoran *et al.* [242] bestimmten dagegen direkt mittels Sekundärionenmassenspektroskopie (SIMS) die Deuteriumkonzentration, die bei einer Diffusionstemperatur von $T = 750\text{ °C}$ aus einer deuterierten amorphen SiN-Schicht (a-SiN_x:D) durch einen 215 µm dicken FZ c-Si Wafer in eine a-Si Schicht diffundiert. Die dabei für Temperzeiten zwischen $t = 1\text{ s}$ und $t = 300\text{ s}$ ermittelte Wasserstoffkonzentration beträgt $10^{18}\text{ cm}^{-3} \leq [H] \leq 10^{19}\text{ cm}^{-3}$ und liegt somit deutlich über der aus indirekten Messungen bestimmten Konzentration. Dieses Ergebnis macht deutlich, dass während der Festphasenkristallisation für 24 h bei $T = 600\text{ °C}$ vermutlich eine große Menge Wasserstoff durch den auf SiN/Borofloat Glas abgeschiedenen a-Si/poly-Si Film diffundiert. Hierbei können alle in Abschnitt 4.2.6 beschriebenen wasserstoffbedingten Prozesse stattfinden. Die geringe Konzentration freier Ladungsträger in den festphasenkristallisierten poly-Si Filmen auf SiN/Borofloat Glas könnte demnach insbesondere eine Folge der Neutralisation von Bor-Akzeptoren durch Bildung von (B–H)-Komplexen (siehe Gleichung 4.62) sein.

Extrinsische Verunreinigungen

Neben den zuvor genannten Effekten können auch extrinsische Verunreinigungen als Ursache für die unterschiedlichen elektronischen Eigenschaften der poly-Si Filme nicht ausgeschlossen werden. Fremdatome können sowohl während der Elektronenstrahldeposition im Hochvakuum in das amorphe Ausgangsmaterial eingebaut werden als auch während der anschließenden Festphasenkristallisation aus dem Substrat in die Filme diffundieren. In ersterem Fall handelt es sich dabei um Elemente, die im Restgas der Vakuumkammer oder im verwendeten Ausgangsmaterial vorhanden waren, wohingegen in letzterem Fall eher von den für das Glassubstrat typischen Elementen auszugehen ist. Da für die hier untersuchten poly-Si Filme keine entsprechenden experimentellen Daten (z.B. aus SIMS-Untersuchungen) vorliegen, kann an dieser Stelle nur mit Hilfe von Literaturdaten über mögliche Verunreinigungen spekuliert werden. Zu den wichtigsten Verunreinigungen in Si zählen Sauerstoff (O), Kohlenstoff (C) und Stickstoff (N). Weitere Verunreinigungen, die aus dem Glassubstrat stammen können sind u.a. Aluminium (Al), Bor (B), Calcium (Ca), Barium (Ba), Magnesium (Mg), Strontium (Sr) und Arsen (As). Die Konzentration dieser Elemente in den hier verwendeten Borsilikat- bzw. Boraluminiumsilikat-Gläsern (Schott Borofloat® 33 und Corning 1737F) liegt dabei zwischen $\approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ und $\approx 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ [42, 152]. Abb. 4.20 gibt einen Überblick über die elektronischen Zustände dieser Verunreinigungen in der Bandlücke von Silizium [244]. Angegeben ist hierbei jeweils der energetische Abstand des Defektniveaus zur näher gelegenen Bandkante, wobei donatorartige Zustände durch positive und akzeptorartige Zustände durch negative Energiewerte dargestellt sind. Aufgrund der Tatsache, dass das Borofloat Glas mit einer a-SiN Schicht beschichtet war, die als effektive Diffusionsbarriere wirkt [245, 246], ist davon auszugehen, dass eine Diffusion von Verunreinigungen aus dem Glassubstrat in erster Linie die elektrischen Eigenschaften der poly-Si Filme auf Corning Glas beeinflusst. Diese Annahme ist konsistent mit der beobachteten stärkeren homogenen Verspannung dieser Schichten (Abb. 3.3), die ebenfalls auf den Einbau einer hohen Konzentration von Fremdatomen zurückgeführt werden kann. Eine Eindiffusion der als flache Akzeptoren wirkenden Elemente B und Al könnte zudem die über der nominellen Dotierung liegende freie Ladungsträgerkonzentration in den poly-Si Filmen auf Corning Glas erklären (Abb. 3.7). SIMS-Untersuchungen von Wang und Awadelkarim [247] an poly-Si Filmen auf unbeschichtetem Glas zeigen nach der Festphasenkristallisation ($T = 600 \text{ }^\circ\text{C}$, $t = 15 \text{ h}$) eine solche Zunahme der Konzentration insbesondere von Al, B und Ba um etwa

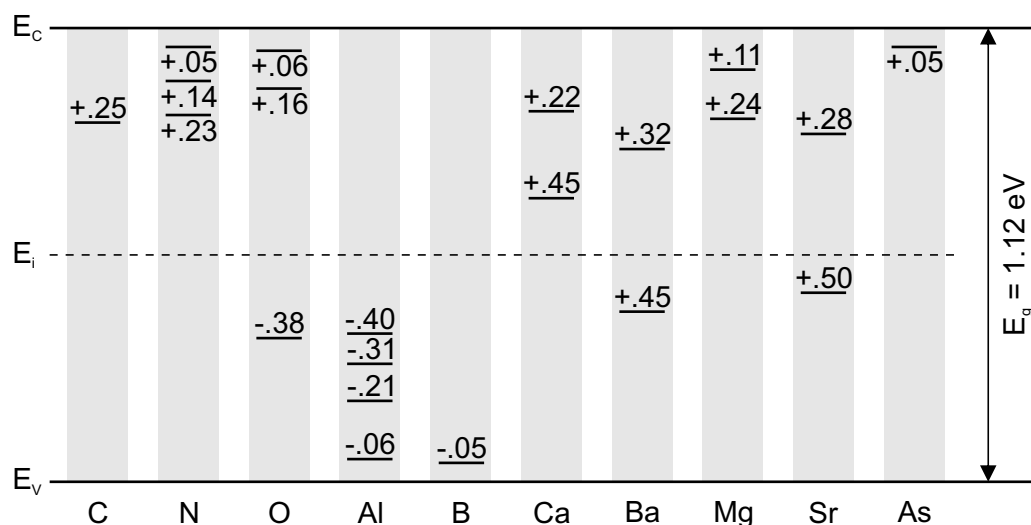


Abbildung 4.20: Energieniveaus einiger für Si typischer bzw. im Glassubstrat enthaltener Verunreinigungen. Angegeben ist jeweils der energetische Abstand zur näher gelegenen Bandkante (E_c : Leitungsbandkante, E_v : Valenzbandkante). Donatorartige Zustände sind durch positive und akzeptorartige Zustände durch negative Energiewerte dargestellt.

eine Größenordnung, die für entsprechende Filme auf SiN-beschichtetem Glas nicht beobachtet wird. Die höhere Verunreinigungskonzentration in den poly-Si Filmen auf unbeschichtetem Glas geht in dieser Arbeit mit einer verringerten Aktivierungsenergie der Dunkelleitfähigkeit sowie mit deutlich schlechteren Transistorcharakteristiken einher [246]. Diese Ergebnisse zeigen, dass die elektrischen Eigenschaften der poly-Si Filme auf Corning Glas mit großer Wahrscheinlichkeit auch durch extrinsische Verunreinigungen aus dem Substrat bestimmt werden. Allerdings ist auch festzuhalten, dass sich die elektrischen Eigenschaften der poly-Si Filme auf dem als Referenzsubstrat dienenden oxidierten Si-Wafer nicht wesentlich von denen auf Corning Glas unterscheiden, was mit Ausnahme von Sauerstoff im deutlichen Widerspruch zu einer Verunreinigung mit Elementen aus dem Glassubstrat steht. Aufschluss hierüber kann allerdings nur die chemische Analyse der in den Si-Schichten vorhandenen Elemente (z.B. mittels SIMS oder EDX) geben, die deshalb Gegenstand weiterer Untersuchungen sein sollte.

5 Zusammenfassung

Die elektronische Qualität von polykristallinem Silizium (poly-Si) wird entscheidend von Korngrenzen und im Material vorhandenen intrinsischen und extrinsischen Defekten bestimmt. Ein physikalisches Verständnis dieser Defekte und ihrer Auswirkung auf den Ladungstransport ist somit essentiell für die Steigerung der Leistungsfähigkeit nahezu aller auf poly-Si basierender elektronischer Bauelemente. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde der Einfluss verschiedener Präparationsparameter sowie einer Wasserstoffnachbehandlung auf Defekte und den Ladungstransport in festphasenkristallisiertem poly-Si untersucht. Im Folgenden sind die wichtigsten Ergebnisse und Schlussfolgerungen zusammengefasst.

Die Festphasenkristallisation von amorphem Silizium (a-Si) auf Glas führt zu einer tensilen Verspannung von bis zu $\sigma \approx 0.8$ GPa in den resultierenden poly-Si Schichten, als deren Ursprung die Grenzfläche zum Substrat nachgewiesen werden konnte. Neben der unterschiedlichen thermischen Ausdehnung von Schicht und Substrat wurde eine mit dem Phasenübergang von a-Si zu poly-Si verbundene Dichteabnahme als mögliche Ursache für die Verspannung identifiziert.

Der Ladungstransport in festphasenkristallisiertem poly-Si hängt entscheidend vom verwendeten Substrat ab. Poly-Si Schichten auf Corning Glas zeigen bei hohen Temperaturen ein für den Ladungstransport über Potentialbarrieren typisches Transportverhalten. Die energetische Lage und die Konzentration der hierfür verantwortlichen donatorartigen Korngrenzendefekte konnte zu $E_V - E_t \approx 0.4$ eV und $N_t \approx 4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ bestimmt werden. Poly-Si Schichten auf SiN-beschichtetem Borofloat Glas zeigen dagegen eine starke Ladungsträgerverarmung mit einer Dotiereffizienz von nur etwa 10^{-4} und einen für einkristallines Material typischen Ladungstransport. Als mögliche Ursachen für dieses gegensätzliche Verhalten wurden eine Bandverbiegung an der Grenzfläche zum Substrat, eine Wasserstoffdiffusion aus der SiN-Pufferschicht sowie intrinsische und extrinsische Defekte innerhalb der Kristallite vorgeschlagen.

Für die thermisch aktivierte Leitfähigkeit aller poly-Si Schichten bei hohen Temperaturen wird eine Meyer-Neldel-Relation (MNR) zwischen dem exponentiellen Vorfaktor und der Aktivierungsenergie beobachtet. Das Auftreten der MNR sowie die experimentell bestimmten Meyer-Neldel-Parameter von $\sigma_{00} \approx 0.1 (\Omega\text{cm})^{-1}$ und $kT_{\text{iso}} \approx 56 \text{ meV}$ lassen sich sowohl im Zustandsdichtemodell mit einer statistischen Verschiebung der Fermienergie als auch mit einer Vielphononenanregung in einem thermodynamischen Modell interpretieren.

Die Temperatur- und Intensitätsabhängigkeit der Photoleitung in festphasenkristallisiertem poly-Si weist deutliche Ähnlichkeiten zum Phototransport in a-Si auf. Poly-Si Schichten mit hoher Photosensitivität auf Corning Glas zeigen zudem eine deutliche Abhängigkeit der Photoleitfähigkeit von der Richtung der zur Messung verwendeten Temperaturrampe. Verantwortlich für diese Hysterese ist eine Umladung von Defektzentren durch photogenerierte Ladungsträger. Mittels thermisch stimulierter Strommessungen wurden fünf diskrete Defektzentren mit Aktivierungsenergien E_a von 0.12, 0.25, 0.35, 0.46 und 0.50 eV ermittelt.

Ein prominenter Defekt in poly-Si sind ungesättigte Si-Bindungen (Dangling-Bonds), die mittels Elektronenspinresonanz identifiziert und quantifiziert wurden. In unpassivierten poly-Si Schichten liegt ihre Konzentration N_S zwischen $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (amorph abgeschieden und festphasenkristallisiert) und $9 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (direkt polykristallin abgeschieden) und korreliert mit der aus photothermischen Absorptionsmessungen bestimmten integralen Defektabsorption A_{PDS} . Der Proportionalitätsfaktor zwischen N_S und A_{PDS} beträgt $5.5 \cdot 10^{16} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$.

Durch eine Wasserstoffpassivierung werden die Transporteigenschaften von festphasenkristallisiertem poly-Si in komplexer Weise beeinflusst. Neben der typischen Verbesserung wurde, abhängig vom verwendeten Substrat und der Passivierungsdauer, auch eine Verschlechterung der elektronischen Materialeigenschaften beobachtet. Verantwortlich hierfür sind wasserstoffinduzierte Defekte, wie z.B. Platelets, die anhand ihrer lokalen Schwingungsmode bei $\nu \approx 1550 \text{ cm}^{-1}$ nachgewiesen werden konnten.

Literaturverzeichnis

- [1] C. R. M. GROVENOR, Grain boundaries in semiconductors, *J. Phys. C* **18** (1985), 4079–4119.
- [2] C. H. SEAGER, Grain boundaries in polycrystalline silicon, *Ann. Rev. Mater. Sci.* **15** (1985), 271–302.
- [3] S. PIZZINI, P. CAGNONI, A. SANDRINELLI, M. ANDERLE UND R. CANTERI, Grain boundary segregation of oxygen and carbon in polycrystalline silicon, *Appl. Phys. Lett.* **51** (1987), 676–678.
- [4] L. L. KAZMERSKI, P. J. IRELAND UND T. F. CISZEK, Evidence for the segregation of impurities to grain boundaries in multigrained silicon using Auger electron spectroscopy and secondary ion mass spectroscopy, *Appl. Phys. Lett.* **36** (1980), 323–325.
- [5] S. KUMARI, S. K. JAIN, B. K. DAS UND G. C. JAIN, On the effective minority carrier diffusion length of polycrystalline silicon solar cells, *Solar Cells* **9** (1983), 209–214.
- [6] S. N. SINGH, S. KUMARI UND B. K. DAS, Electrical properties of polycrystalline silicon and zinc oxide semiconductors, *Bull. Mater. Sci.* **6** (1984), 243–258.
- [7] H. F. MATARÉ, Carrier transport at grain boundaries in semiconductors, *J. Appl. Phys.* **56** (1984), 2605–2631.
- [8] C. H. SEAGER UND D. S. GINLEY, Passivation of grain boundaries in polycrystalline silicon, *Appl. Phys. Lett.* **34** (1979), 337–340.
- [9] N. M. JOHNSON, D. K. BIEGELSEN UND M. D. MOYER, Deuterium passivation of grain-boundary dangling bonds in silicon thin films, *Appl. Phys. Lett.* **40** (1982), 882–884.

- [10] N. H. NICKEL, N. M. JOHNSON UND W. B. JACKSON, Hydrogen passivation of grain boundary defects in polycrystalline silicon thin films, *Appl. Phys. Lett.* **62** (1993), 3285–3287.
- [11] T. I. KAMINS UND T. KAMINS, *Polycrystalline silicon for integrated circuits and displays*, Springer, Berlin, 1998.
- [12] C. R. KAGAN UND P. ANDRY, *Thin-Film Transistors*, Marcel Dekker, New York, 2003.
- [13] S. D. BROTHERTON, Polycrystalline silicon thin film transistors, *Semicond. Sci. Technol.* **10** (1995), 721–738.
- [14] T. SAMESHIMA, M. HARA UND S. USUI, XeCl Excimer Laser Annealing Used to Fabricate Poly-Si TFT's, *Jpn. J. Appl. Phys.* **28** (1989), 1789–1793.
- [15] M. GREEN, Thin-film solar cells: review of materials, technologies and commercial status, *J. Mater. Sci.* **18** (2007), 15–19.
- [16] W. FUHS, S. GALL, B. RAU, M. SCHMIDT UND J. SCHNEIDER, A novel route to a polycrystalline silicon thin-film solar cell, *Sol. Energy* **77** (2004), 961–968.
- [17] R. BERGMANN, Crystalline Si thin-film solar cells: a review, *Appl. Phys. A* **69** (1999), 187–194.
- [18] K. SESHAN, Hrsg., *Handbook of thin film deposition*, William Andrew Publishing/Noyes, New York, 2002.
- [19] W. G. J. H. M. VAN SARK, Methods of deposition of hydrogenated amorphous silicon for device applications, In *Advances in Plasma-Grown Hydrogenated Films*, M. H. Francombe, Hrsg., Bd. 30 d. Reihe *Thin Films and Nanostructures*. Academic Press, San Diego, 2002, S. 1–215.
- [20] R. B. BERGMANN, G. OSWALD, M. ALBRECHT UND V. GROSS, Solid-phase crystallized Si films on glass substrates for thin film solar cells, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **46** (1997), 147–155.
- [21] G. OLSON UND J. ROTH, Kinetics of solid phase crystallization in amorphous silicon, *Mater. Sci. Rep.* **3** (1988), 1–77.

- [22] R. A. MCMAHON, Formation of silicon-on-insulator layers by electron beam recrystallization, *Microelectron. Eng.* **8** (1988), 255–272.
- [23] N. H. NICKEL, Hrsg., *Laser Crystallization of Silicon*, Elsevier, 2003.
- [24] S. R. HERD, P. CHAUDHARI UND M. H. BRODSKY, Metal contact induced crystallization in films of amorphous silicon and germanium, *J. Non-Cryst. Solids* **7** (1972), 309–327.
- [25] D. SONG, D. INNS, A. STRAUB, M. L. TERRY, P. CAMPBELL UND A. G. ABERLE, Solid phase crystallized polycrystalline thin-films on glass from evaporated silicon for photovoltaic applications, *Thin Solid Films* **513** (2006), 356–363.
- [26] M. E. COWHER UND T. O. SEDGWICK, Chemical Vapor Deposited Polycrystalline Silicon, *J. Electrochem. Soc.* **119** (1972), 1565–1570.
- [27] A. L. FRIPP UND L. H. SLACK, Resistivity of Doped Polycrystalline Silicon Films, *J. Electrochem. Soc.* **120** (1973), 145–146.
- [28] M. M. MANDURAH, K. C. SARASWAT, C. R. HELMS UND T. I. KAMINS, Dopant segregation in polycrystalline silicon, *J. Appl. Phys.* **51** (1980), 5755–5763.
- [29] T. I. KAMINS, Hall Mobility in Chemically Deposited Polycrystalline Silicon, *J. Appl. Phys.* **42** (1971), 4357–4365.
- [30] J. Y. W. SETO, The electrical properties of polycrystalline silicon films, *J. Appl. Phys.* **46** (1975), 5247–5254.
- [31] G. BACCARANI, B. RICCO UND G. SPADINI, Transport properties of polycrystalline silicon films, *J. Appl. Phys.* **49** (1978), 5565–5570.
- [32] M. M. MANDURAH, K. C. SARASWAT UND T. I. KAMINS, Phosphorus Doping of Low Pressure Chemically Vapor-Deposited Silicon Films, *J. Electrochem. Soc.* **126** (1979), 1019–1023.
- [33] N. C. C. LU, L. GERZBERG UND J. D. MEINDL, A quantitative model of the effect of grain size on the resistivity of polycrystalline silicon resistors, *IEEE Electr. Dev. Lett.* **1** (1980), 38–41.

- [34] N. C. C. LU, L. GERZBERG, C.-Y. LU UND J. D. MEINDL, Modeling and optimization of monolithic polycrystalline silicon resistors, *IEEE Trans Electron. Dev.* **28** (1981), 818–830.
- [35] H. L. KWOK UND K. HO, A three-dimensional model for the transport properties of polycrystalline silicon, *J. Phys. D* **15** (1982), 2271–2281.
- [36] S. MORRISON, The effect of grain boundary shunt currents on mis solar cell performance, *J. Electron. Mater.* **11** (1982), 21–35.
- [37] B. K. MIREMADI UND S. R. MORRISON, Conductance along iron-doped silicon grain boundaries, *J. Appl. Phys.* **55** (1984), 3658–3663.
- [38] C. H. SEAGER UND G. E. PIKE, Electron tunneling through GaAs grain boundaries, *Appl. Phys. Lett.* **40** (1982), 471–474.
- [39] J. H. WERNER, Origin of curved Arrhenius plots for the conductivity of polycrystalline semiconductors, *Solid State Phenom.* **37–38** (1994), 213–218.
- [40] Datenblatt für Corning 1737F bereitgestellt von der Corning Inc., NY, USA.
- [41] Datenblatt für Mucasal[®]-Reinigungslösung bereitgestellt von der Firma Merz Hygiene GmbH, Frankfurt/M., Germany.
- [42] Datenblatt für Schott Borofloat[®] 33 bereitgestellt von der SCHOTT Technical Glass Solutions GmbH, Jena, Germany.
- [43] N. M. JOHNSON, J. WALKER UND K. S. STEVENS, Characterization of a remote hydrogen plasma reactor with electron spin resonance, *J. Appl. Phys.* **69** (1981), 2631–2634.
- [44] W. B. JACKSON, N. M. AMER, A. C. BOCCARA UND D. FOURNIER, Photothermal deflection spectroscopy and detection, *J. Appl. Opt.* **20** (1981), 1333–1344.
- [45] W. B. JACKSON UND N. M. AMER, The electrical properties of polycrystalline silicon films, *Phys. Rev. B* **25** (1982), 5559–5562.
- [46] P. ZEEMAN, On the influence of magnetism on the nature of the light emitted by a substance, *Philos. Mag.* **43** (1897), 226–239.

- [47] T. ISHIDATE, K. INOUE, K. TSUJI UND S. MINOMURA, Raman scattering in hydrogenated amorphous silicon under high pressure, *Solid State Commun.* **42** (1982), 197–200.
- [48] E. ANASTASSAKIS, A. PINCZUK, E. BURSTEIN, F. H. POLLAK UND M. CARDONA, Effect of static uniaxial stress on the Raman spectrum of silicon, *Solid State Commun.* **8** (1970), 133–138.
- [49] N. NAKANO, L. MARVILLE UND R. REIF, Raman scattering in polycrystalline silicon doped with boron, *J. Appl. Phys.* **72** (1992), 3641–3647.
- [50] Z. IQBAL UND S. VEPREK, Raman scattering from hydrogenated microcrystalline and amorphous silicon, *J. Phys. C* **15** (1982), 377–392.
- [51] G. GOUADEC UND P. COLOMBAN, Raman Spectroscopy of nanomaterials: How spectra relate to disorder, particle size and mechanical properties, *Prog. Cryst. Growth Charact. Mater.* **53** (2007), 1–56.
- [52] L. V. AVAKYANTS, L. L. GERASIMOV, V. S. GORELIK, N. M. MANJA, E. OBRAZTSOVA UND Y. I. PLOTNIKOV, Raman scattering in amorphous silicon films, *J. Mol. Struct.* **267** (1992), 177–184.
- [53] V. PAILLARD, P. PUECH, M. A. LAGUNA, P. TEMPLE-BOYER, B. CAUSAT, J. P. COUDERC UND B. DE MAUDUIT, Resonant Raman scattering in polycrystalline silicon thin films, *Appl. Phys. Lett.* **73** (1998), 1718–1720.
- [54] M. YANG, D. HUANG, P. HAO, F. ZHANG, X. HOU UND X. WANG, Study of the Raman peak shift and the linewidth of light-emitting porous silicon, *J. Appl. Phys.* **75** (1994), 651–653.
- [55] H. RICHTER, Z. P. WANG UND L. LEY, The one phonon Raman spectrum in microcrystalline silicon, *Solid State Commun.* **39** (1981), 625–629.
- [56] E. ANASTASSAKIS, Strain characterization of polycrystalline diamond and silicon systems, *J. Appl. Phys.* **86** (1999), 249–258.
- [57] I. H. CAMPBELL UND P. M. FAUCHET, The effects of microcrystal size and shape on the one phonon Raman spectra of crystalline semiconductors, *Solid State Commun.* **58** (1986), 739–741.

- [58] P. LENGSELD UND N. H. NICKEL, Stress characterization of undoped and doped laser crystallized poly-Si on different substrates using Raman spectroscopy, *J. Non-Cryst. Solids* **299–302** (2002), 778–782.
- [59] I. M. ABDYUKHANOV, B. A. PRUSAKOV, V. S. GORELIK UND V. G. PLOTNICHENKO, Effect of annealing on the structure of polycrystalline silicon, *Met. Sci. Heat Treat.* **40** (1998), 405–407.
- [60] P. LENGSELD UND N. H. NICKEL, Chapter 5: Structural and Electronic Properties of Laser-Crystallized Poly-Si, In *Laser Crystallization of Silicon*, N. H. Nickel, Hrsg., Bd. 75 d. Reihe *Semiconductors and Semimetals*. Elsevier, 2003, S. 119–172.
- [61] P. STRADINS, D. YOUNG, H. BRANZ, M. PAGE UND Q. WANG, Real time monitoring of the crystallization of hydrogenated amorphous silicon, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **862** (2005), A16.1.1–A16.1.16.
- [62] D. YOUNG, P. STRADINS, E. IWANICZKO, B. TO, B. REEDY, Y. YAN, H. BRANZ, J. LOHR, M. ALVAREZ, J. BOOSKE, A. MARCONNET UND Q. WANG, Solid phase crystallization of hot-wire CVD amorphous silicon films, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **862** (2005), 10.5.1–A10.5.6.
- [63] D. H. WARRINGTON UND M. BOON, Ordered structures in random grain boundaries; some geometrical probabilities, *Acta Metall.* **23** (1975), 599–607.
- [64] A. GOYAL, E. D. SPECHT, D. M. KROEGER UND T. A. MASON, Effect of texture on grain boundary misorientation distributions in polycrystalline high temperature superconductors, *Appl. Phys. Lett.* **68** (1996), 711–713.
- [65] S. TSUREKAWA UND T. WATANABE, Effects of Grain Boundary Structure and Chemistry on Electrical Activity in Polycrystalline Silicon, *Solid State Phenom.* **93** (2003), 333–338.
- [66] R. C. REEDY, D. YOUNG, H. M. BRANZ UND Q. WANG, SIMS study of elemental diffusion during solid phase crystallization of amorphous silicon, In *2005 DOE Solar Energy Technologies Program Review Meeting* (2005).

- [67] L.-P. SCHELLER, M. WEIZMAN, N. H. NICKEL UND B. YAN, Electrical transport in laser-crystallized polycrystalline silicon-germanium thin-films, *Appl. Phys. Lett.* **95** (2009), 062101/1–3.
- [68] W. MEYER UND H. NELDEL, Über die Beziehungen zwischen der Energiekonstanten ϵ und der Mengenkonsanten a in der Leitwerts-Temperaturformel bei oxydischen Halbleitern, *Z. Tech. Phys.* **12** (1937), 588–593.
- [69] R. A. STREET, *Hydrogenated amorphous silicon*, Cambridge University Press, 1991.
- [70] H. OVERHOF UND P. THOMAS, *Electronic Transport in Hydrogenated Amorphous Semiconductors*, Springer Verlag, 1989.
- [71] M. KIKUCHI, The Meyer-Neldel rule and the statistical shift of the Fermi level in amorphous semiconductors, *J. Appl. Phys.* **64** (1988), 4997–5001.
- [72] A. YELON UND B. MOVAGHAR, Microscopic explanation of the compensation (Meyer-Neldel) rule, *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990), 618–620.
- [73] A. YELON, B. MOVAGHAR UND H. M. BRANZ, Origin and consequences of the compensation (Meyer-Neldel) law, *Phys. Rev. B* **46** (1992), 12244–12250.
- [74] S. M. SZE, *Physics of Semiconductor Devices (2nd Edition)*, John Wiley & Sons, 1981.
- [75] M. ASCHE UND J. VON BORZESZKOWSKI, On the temperature dependence of hole mobility in silicon, *phys. stat. sol.* **37** (1970), 433–438.
- [76] G. W. LUDWIG UND R. L. WATTERS, Drift and Conductivity Mobility in Silicon, *Phys. Rev.* **101** (1956), 1699–1701.
- [77] H. METTE, W. W. GÄRTNER UND C. LOSCOE, Nernst and Ettingshausen Effects in Silicon between 300°K and 800°K, *Phys. Rev.* **117** (1960), 1491–1493.
- [78] J. BATISTA, A. MANDELIS UND D. SHAUGHNESSY, Temperature dependence of carrier mobility in Si wafers measured by infrared photocarrier radiometry, *Appl. Phys. Lett.* **82** (2003), 4077–4079.
- [79] C. KITTEL, *Einführung in die Festkörperphysik*, Oldenbourg, 2002.

- [80] G. W. TAYLOR UND J. G. SIMMONS, Photoconductivity and the determination of trapping parameters in amorphous semiconductors, *J. Phys. C* **7** (1973), 3067–3074.
- [81] S. K. RAM, S. KUMAR, R. VANDERHAGHEN, B. DREVILLON UND P. R. I CA-BARROCAS, Recombination traffic in highly crystallized undoped microcrystalline Si films studied by steady state photoconductivity, *Thin Solid Films* **511–512** (2006), 556–561.
- [82] G. J. ADRIAENSSENS, Distribution of gap states in a-As₂Se₃, *Philos. Mag. B* **62** (1991), 79–87.
- [83] J. G. SIMMONS UND G. W. TAYLOR, Theory of photoconductivity in amorphous semiconductors containing relatively narrow trap bands, *J. Phys. C* **7** (1973), 3051–3066.
- [84] H. C. WRIGHT UND G. A. ALLEN, Thermally stimulated current analysis, *Brit. J. Appl. Phys.* **17** (1966), 1181–1185.
- [85] H. P. MARUSKA, A. K. GHOSH, A. ROSE UND T. FENG, Hall mobility of polycrystalline silicon, *Appl. Phys. Lett.* **36** (1980), 381–383.
- [86] D. P. BHATT UND D. P. JOSHI, Electrical properties of polycrystalline silicon under optical illumination, *J. Appl. Phys.* **68** (1990), 2338–2345.
- [87] M. R. MURTI UND K. V. REDDY, Recombination properties of photogenerated minority carriers in polycrystalline silicon, *J. Appl. Phys.* **70** (1991), 3683–3688.
- [88] G. C. MCGONIGAL, D. J. THOMSON, J. G. SHAW UND H. C. CARD, Electronic transport at grain boundaries in silicon, *Phys. Rev. B* **28** (1983), 5908–5922.
- [89] C. H. SEAGER, Grain boundary recombination: Theory and experiment in silicon, *J. Appl. Phys.* **52** (1981), 3960–3968.
- [90] P. KIVITS UND H. J. L. HAGEBEUK, Evaluation of the model for thermally stimulated luminescence and conductivity; reliability of trap depth determinations, *J. Lumin.* **15** (1977), 1–27.
- [91] R. H. BUBE, *Photoconductivity of Solids*, John Wiley & Sons, 1960.

- [92] J. T. RANDALL UND M. H. F. WILKINS, The Phosphorescence of Various Solids, *Proc. Roy. Soc. A* **184** (1945), 347–364.
- [93] H. SCHADE UND D. HERRICK, Determination of deep centers in silicon by thermally stimulated conductivity measurements, *Solid-State Electron.* **12** (1969), 857–860.
- [94] C.-M. HONG UND D. E. DAY, Thermally Stimulated Currents in Sodium Silicate Glasses, *J. Am. Ceram. Soc.* **64** (1981), 61–68.
- [95] C. MANFREDOTTI, R. MURRI, A. QUIRINI UND L. VASANELLI, Photoelectronic properties of n-GaSe, *phys. stat. sol. (a)* **38** (1976), 685–693.
- [96] L. R. WEISBERG UND H. SCHADE, A Technique for Trap Determinations in Low-Resistivity Semiconductors, *J. Appl. Phys.* **39** (1968), 5149–5151.
- [97] M. TOMOZANE UND Y. NANNICHI, Improved Thermally Stimulated Current Spectroscopy to Characterize Levels in Semi-Insulating GaAs, *Jap. J. Appl. Phys.* **25** (1986), L273–L275.
- [98] J. C. MULLER, C. SCHARAGER, M. TOULEMONDE UND P. SIFFERT, Recrystallization of silicon by pulsed laser, *Rev. Phys. Appl.* **15** (1980), 865–868.
- [99] W. FUHS UND M. MILLEVILLE, Thermally Stimulated Currents in Amorphous Silicon, *phys. stat. sol. (b)* **98** (1980), K29–K32.
- [100] D. S. MISRA, V. A. SINGH UND S. C. AGARWAL, Thermally stimulated current studies of the density of gap states in amorphous silicon, *Solid State Commun.* **55** (1985), 147–150.
- [101] N. H. NICKEL, G. B. ANDERSON UND R. I. JOHNSON, Grain-boundary defects in laser-crystallized polycrystalline silicon, *Phys. Rev. B* **56** (1997), 12065–12068.
- [102] R. BISARO, J. MAGARIO, K. ZELLAMA, S. SQUELARD, P. GERMAIN UND J. F. MORHANGE, Solid-phase crystallization kinetics in doped a-Si chemical-vapor-deposition films, *Phys. Rev. B* **31** (1985), 3568–3575.
- [103] H. HAMADA, A. SASAKI, Y. OKITA UND T. NIINA, Polysilicon Thin-Film Transistors Processed at Low Temperature (≤ 600 °C) Using Solid-Phase Crystallization in Wet Oxygen Atmosphere, *Jap. J. Appl. Phys.* **35** (1996), L680–L682.

- [104] N. H. NICKEL, Chapter 4: Hydrogen in Polycrystalline Silicon, In *Hydrogen in Semiconductors II*, N. H. Nickel, Hrsg., Bd. 61 d. Reihe *Semiconductors and Semimetals*. Elsevier, 1999, S. 83–163.
- [105] H. R. PHILIPP UND H. EHRENREICH, *Semiconductors and Semimetals*, Academic Press, 1967, S. 93.
- [106] F. DIEHL, B. SCHRÖDER UND H. OECHSNER, Light scattering and enhanced optical absorption in hot wire microcrystalline silicon, *J. Appl. Phys.* **84** (1998), 3416–3418.
- [107] F. DIEHL, M. SCHEIB, B. SCHRÖDER UND H. OECHSNER, Enhanced optical absorption in hydrogenated microcrystalline silicon: an absorption model, *J. Non-Cryst. Solids* **227–230** (1998), 973–976.
- [108] W. B. JACKSON, The correlation energy of the dangling silicon bond in a-Si:H, *Solid State Commun.* **44** (1982), 477–480.
- [109] W. B. JACKSON, N. M. JOHNSON UND D. K. BIEGELSEN, Density of gap states of silicon grain boundaries determined by optical absorption, *Appl. Phys. Lett.* **43** (1983), 195–197.
- [110] S. KLEIN, F. FINGER, R. CARIUS, T. DYLLA UND J. KLOMFASS, Relationship between the optical absorption and the density of deep gap states in microcrystalline silicon, *J. Appl. Phys.* **102** (2007), 103501/1–5.
- [111] J. TAUC, *Amorphous and liquid semiconductors*, Plenum, London, 1974.
- [112] R. PANDYA UND B. A. KHAN, Transient photocurrent response in polycrystalline silicon thin films, *J. Appl. Phys.* **62** (1987), 3244–3248.
- [113] D. JOUSSE, S. L. DELAGE UND S. S. IYER, Grain-boundary states and hydrogenation of fine-grained polycrystalline silicon films deposited by molecular beams, *Philos. Mag. B* **63** (1991), 443–455.
- [114] V. AROLE, M. TAKWALE UND V. BHIDE, Effect of hydrogen passivation on electrical transport in polycrystalline silicon, *Sol. Energy Mater.* **20** (1990), 91–97.

- [115] N. H. NICKEL, Hydrogen-induced defects in polycrystalline silicon, *J. Non-Cryst. Solids* **198–200** (1996), 46–51.
- [116] N. H. NICKEL, W. B. JACKSON, N. M. JOHNSON UND J. WALKER, Hydrogen Induced Passivation and Generation of Defects in Polycrystalline Silicon, *phys. stat. sol. (a)* **159** (1997), 65–74.
- [117] D. EMIN, The sign of the Hall effect in hopping conduction, *Philos. Mag.* **35** (1977), 1189–1198.
- [118] M. GRUNEWALD, P. THOMAS UND D. WURTZ, The sign anomaly of the Hall effect in amorphous tetrahedrally bonded semiconductors: a chemical-bond orbital approach, *J. Phys. C* **14** (1981), 4083–4093.
- [119] C. A. DIMITRIADIS, D. H. TASSIS, N. A. ECONOMOU UND A. J. LOWE, Determination of bulk states and interface states distributions in polycrystalline silicon thin-film transistors, *J. Appl. Phys.* **74** (1993), 2919–2924.
- [120] T. WATANABE, H. WATAKABE, T. SAMESHIMA UND M. MIYASAKA, Electrical properties of solid-phase crystallized polycrystalline silicon films, *Appl. Phys. A* **77** (2003), 87–92.
- [121] S. HASEGAWA, S. TAKENAKA UND Y. KURATA, Plasma-hydrogenation effects on conductivity and electron spin resonance in undoped polycrystalline silicon, *J. Appl. Phys.* **53** (1982), 5022–5027.
- [122] N. M. JOHNSON, F. A. PONCE, R. A. STREET UND R. J. NEMANICH, Defects in single-crystal silicon induced by hydrogenation, *Phys. Rev. B* **35** (1987), 4166–4169.
- [123] N. H. NICKEL, N. M. JOHNSON UND J. WALKER, Hydrogen-Induced Generation of Acceptorlike Defects in Polycrystalline Silicon, *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995), 3720–3723.
- [124] M. STUTZMANN UND C. P. HERRERO, Hydrogen passivation of shallow acceptors in silicon, *Phys. Scr.* **T23** (1988), 276–288.
- [125] N. JOHNSON, C. DOLAND, F. PONCE, J. WALKER UND G. ANDERSON, Hydrogen in crystalline semiconductors: A review of experimental results, *Physica B* **170** (1991), 3–20.

- [126] D. A. ANDERSON UND W. E. SPEAR, Photoconductivity and recombination in doped amorphous silicon, *Philos. Mag.* **36** (1977), 695–712.
- [127] H. FRITZSCHE, B.-G. YOON, D.-Z. CHI UND M. Q. TRAN, Some observations on the photoconductivity of amorphous semiconductors, *J. Non-Cryst. Solids* **141** (1992), 123–132.
- [128] R. BRÜGGEMANN UND C. MAIN, Fermi-level effect on steady-state and transient photoconductivity in microcrystalline silicon, *Phys. Rev. B* **57** (1998), R15080–R15083.
- [129] P. A. TEMPLE UND C. E. HATHAWAY, Multiphonon Raman Spectrum of Silicon, *Phys. Rev. B* **7** (1973), 3685–3697.
- [130] W. P. ACKER, B. YIP, D. H. LEACH UND R. K. CHANG, The use of a charge-coupled device and position sensitive resistive anode detector for multiorder spontaneous Raman spectroscopy from silicon, *J. Appl. Phys.* **64** (1988), 2263–2270.
- [131] K. BRENDDEL, *Laserkristallisiertes polykristallines Silizium - Wasserstoffbindungen und elektronische Eigenschaften*, Dissertation, Universität Marburg, 2003.
- [132] N. H. NICKEL, K. BRENDDEL UND R. SALEH, Laser crystallization of hydrogenated amorphous silicon, *phys. stat. sol. (c)* **1** (2004), 1154–1168.
- [133] N. H. NICKEL, G. B. ANDERSON UND J. WALKER, Hydrogen-induced platelets in disordered silicon, *Solid State Commun.* **99** (1996), 427–431.
- [134] J. A. THORNTON UND D. W. HOFFMAN, Stress-related effects in thin films, *Thin Solid Films* **171** (1989), 5–31.
- [135] S. M. HU, Stress-related problems in silicon technology, *J. Appl. Phys.* **70** (1991), R53–R80.
- [136] M. STADTMÜELLER, Mechanical Stress of CVD-Dielectrics, *J. Electrochem. Soc.* **139** (1992), 3669–3674.
- [137] R. W. HOFFMAN, The mechanical properties of thin condensed films, *Phys. Thin Films* **3** (1966), 211–273.

- [138] K. TANAKA, K. MINOSHIMA UND T. IMOTO, Young's Modulus of Polysilicon Thin Film Evaluated by Finite Element Analysis, *Key Eng. Mater.* **353–358** (2007), 2227–2230.
- [139] W. N. SHARPE, B. YUAN UND R. VAIDYANATHAN, Measurements of Youngs's modulus, Poissons's ratio and tensile strength of polysilicon, In *Proceedings of the 10th IEEE Int. Workshop on Microelectromechanical Systems, Nagoya, Japan* (1997), S. 424–429.
- [140] H. WATANABE, N. YAMADA UND M. OKAJI, Linear Thermal Expansion Coefficient of Silicon from 293 to 1000 K, *Int. J. Thermophys.* **25** (2004), 221–236.
- [141] O. MADELUNG, *Semiconductors - Basic Data*, Springer, Berlin, 1996.
- [142] M. MAEDA UND K. IKEDA, Stress evaluation of radio-frequency-biased plasma-enhanced chemical vapor deposited silicon nitride films, *J. Appl. Phys.* **83** (1998), 3865–3870.
- [143] R. E. SAH, H. BAUMANN, R. DRIAD UND J. WAGNER, Correlation Between Composition and Stress for High Density Plasma CVD Silicon Nitride Films, *J. Electrochem. Soc.* **157** (2010), G33–G38.
- [144] H. MIURA, H. OHTA UND N. OKAMOTO, Crystallization-induced stress in silicon thin films, *Appl. Phys. Lett.* **60** (1992), 2746–2748.
- [145] V. SENEZ, T. HOFFMANN, A. ARMIGLIATO UND I. D. WOLF, Numerical analysis of the process-induced stresses in silicon microstructures: application to micromachined cantilever, *Smart Mater. Struct.* **15** (2006), S47–S56.
- [146] W. YOUNG UND R. BUDYNAS, *Roark's Formulas for Stress and Strain*, McGraw-Hill, New York, 2001.
- [147] L. VEGARD, Die Konstitution der Mischkristalle und die Raumfüllung der Atome, *Z. Phys.* **5** (1921), 17–26.
- [148] A. R. DENTON UND N. W. ASHCROFT, Vegard's law, *Phys. Rev. A* **43** (1991), 3161–3164.

- [149] K. G. MCQUHAE UND A. S. BROWN, The lattice contraction coefficient of Boron and Phosphorus in silicon, *Solid-State Electron.* **15** (1972), 259–264.
- [150] H.-J. HERZOG, L. CSEPREGI UND H. SEIDEL, X-Ray Investigation of Boron- and Germanium-Doped Silicon Epitaxial Layers, *J. Electrochem. Soc.* **131** (1984), 2969–2974.
- [151] B. CORDERO, V. GOMEZ, A. E. PLATERO-PRATS, M. REVES, J. ECHEVERRIA, E. CREMADES, F. BARRAGAN UND S. ALVAREZ, Covalent radii revisited, *Dalton Trans.* (2008), 2832–2838.
- [152] L. TIAN UND R. DIECKMANN, Sodium tracer diffusion in an alkaline-earth boroaluminosilicate glass, *J. Non-Cryst. Solids* **265** (2000), 36–40.
- [153] X.-Z. BO, N. YAO, S. R. SHIEH, T. S. DUFFY UND J. C. STURM, Large-grain polycrystalline silicon films with low intragranular defect density by low-temperature solid-phase crystallization without underlying oxide, *J. Appl. Phys.* **91** (2002), 2910–2915.
- [154] R. B. IVERSON UND R. REIF, Recrystallization of amorphized polycrystalline silicon films on SiO₂: Temperature dependence of the crystallization parameters, *J. Appl. Phys.* **62** (1987), 1675–1681.
- [155] Y. KIMURA UND T. KATODA, Effects of strain on crystallization of amorphous silicon characterized by laser Raman spectroscopy, *Appl. Surf. Sci.* **117–118** (1997), 790–793.
- [156] J. H. KIM, J. Y. LEE UND K. S. NAM, High-resolution transmission electron microscopy study of solid phase crystallized silicon thin films on SiO₂: Crystal growth and defects formation, *J. Appl. Phys.* **77** (1995), 95–102.
- [157] L. HAJI, P. JOUBERT, J. STOEMENOS UND N. A. ECONOMOU, Mode of growth and microstructure of polycrystalline silicon obtained by solid-phase crystallization of an amorphous silicon film, *J. Appl. Phys.* **75** (1994), 3944–3952.
- [158] J. W. ORTON UND M. J. POWELL, The Hall effect in polycrystalline and powdered semiconductors, *Rep. Prog. Phys.* **43** (1980), 1263–1307.

- [159] C. H. SEAGER UND T. G. CASTNER, Zero-bias resistance of grain boundaries in neutron-transmutation-doped polycrystalline silicon, *J. Appl. Phys.* **49** (1978), 3879–3889.
- [160] P. K. SINGH, S. N. SINGH UND R. KISHORE, Modeling and observation of photoconductivity in polycrystalline silicon, *Appl. Phys. Lett.* **48** (1986), 127–129.
- [161] T. YAMAZAKI, Y. MATSUMURA, Y. URAOKA UND T. FUYUKI, Dependence of Solar Cell Performance on Electronic Properties at Grain Boundaries in Polycrystalline Silicon Thin Films Deposited by Atmospheric Pressure Chemical Vapor Deposition, *Jap. J. Appl. Phys.* **45** (2006), 6342–6345.
- [162] G. BEAUCARNE UND A. SLAOUI, *Thin Film Solar Cells: Fabrication, Characterization and Applications*, John Wiley & Sons, 2006, Kap. Thin Film Polycrystalline Silicon Solar Cells, S. 97–132.
- [163] P. BROQVIST, A. ALKAUSKAS UND A. PASQUARELLO, Defect levels of dangling bonds in silicon and germanium through hybrid functionals, *Phys. Rev. B* **78** (2008), 075203/1–5.
- [164] E. H. POINDEXTER, G. J. GERARDI, M.-E. RUECKEL, P. J. CAPLAN, N. M. JOHNSON UND D. K. BIEGELSEN, Electronic traps and P_b centers at the Si/SiO₂ interface: Band-gap energy distribution, *J. Appl. Phys.* **56** (1984), 2844–2849.
- [165] G. J. GERARDI, E. H. POINDEXTER, P. J. CAPLAN UND N. M. JOHNSON, Interface traps and P_b centers in oxidized (100) silicon wafers, *Appl. Phys. Lett.* **49** (1986), 348–350.
- [166] L.-A. RAGNARSSON UND P. LUNDGREN, Electrical characterization of P_b centers in (100)Si–SiO₂ structures: The influence of surface potential on passivation during post metallization anneal, *J. Appl. Phys.* **88** (2000), 938–942.
- [167] J. VOLGER, Note on the Hall Potential Across an Inhomogeneous Conductor, *Phys. Rev.* **79** (1950), 1023–1024.
- [168] R. H. BUBE, Interpretation of Hall and photo-Hall effects in inhomogeneous materials, *Appl. Phys. Lett.* **13** (1968), 136–139.

- [169] G. H. BLOUNT, R. H. BUBE UND A. L. ROBINSON, Interpretation of Equilibrium and Steady-State Hall and Thermoelectric Effects in Inhomogeneous Materials, *J. Appl. Phys.* **41** (1970), 2190–2195.
- [170] J. HELESKIVI UND T. SALO, On the Hall Voltage in an Inhomogeneous Material, *J. Appl. Phys.* **43** (1972), 740–742.
- [171] M. G. MATHEW UND K. S. MENDELSON, Hall effect in the „composite sphere“ material, *J. Appl. Phys.* **45** (1974), 4370–4372.
- [172] S. J. KONEZNY, M. N. BUSSAC UND L. ZUPPIROLI, Charge transport mechanisms in microcrystalline silicon, *Appl. Phys. Lett.* **92** (2008), 012107/1–3.
- [173] A. K. FEDOTOV, B. EVTODY, L. FIONOVA, J. ILIASHUK, E. KATZ UND L. POLJAK, Grain boundary structure and electrical activity in shaped silicon, *J. Cryst. Growth* **104** (1990), 186–190.
- [174] R. K. MÜLLER, Current Flow across Grain Boundaries in n-Type Germanium. II, *J. Appl. Phys.* **32** (1961), 640–645.
- [175] P. HAPKE, *VHF-Plasmaabscheidung von mikrokristalinem Silizium (μ c-Si): Einfluss der Plasmaanregungsfrequenz auf die strukturellen und elektrischen Eigenschaften*, Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 1995.
- [176] A. KUBOVÝ UND M. JANDA, Influence of tunnelling through barriers on grain boundaries on hole mobility in polycrystalline tellurium films, *phys. stat. sol. (a)* **40** (1977), 225–233.
- [177] G. G. ROBERTS, N. APSLEY UND R. W. MUNN, Temperature dependent electronic conduction in semiconductors, *Phys. Rep.* **60** (1980), 59–150.
- [178] H. OVERHOF UND W. BEYER, A model for the electronic transport in hydrogenated amorphous silicon, *Philos. Mag. B* **43** (1981), 433–450.
- [179] H. OVERHOF UND P. THOMAS, The statistical shift model for the Meyer-Neldel rule, *Defect and Diffusion Forum* **192–193** (2001), 1–14.
- [180] N. F. MOTT, The pre-exponential factor in the conductivity of amorphous silicon, *Philos. Mag. B* **51** (1985), 19–25.

- [181] J. KAKALIOS UND R. A. STREET, Electronic transport in doped amorphous silicon, *Phys. Rev. B* **34** (1986), 6014–6017.
- [182] K. L. NARASIMHAN UND B. M. ARORA, The capture cross-section and the Meyer-Neldel rule in III-V compound semiconductors, *Solid State Commun.* **55** (1985), 615–617.
- [183] D. P. ALMOND UND A. R. WEST, The activation entropy for transport in ionic conductors, *Solid State Ionics* **23** (1987), 27–35.
- [184] N. F. UVAROV UND E. F. HAIRETDINOV, The compensation law for conductivity of ionic crystals, *J. Solid State Chem.* **62** (1986), 1–10.
- [185] T. J. COUTTS UND N. M. PEARSALL, Meyer–Neldel rule in solar cells, *Appl. Phys. Lett.* **44** (1984), 134–135.
- [186] S. GLASSTONE, K. J. LAIDLER UND H. EYRING, *The Theory of Rate Processes*, McGraw-Hill, New York, 1941.
- [187] S. S. MITRA UND N. E. MASSA, *Handbook of Semiconductors: Band Theory and Transport Properties*, North Holland, New York, 1982, S. 81.
- [188] H. BÖTTGER, *Hopping conduction in solids*, Wiley-VCH, 1985.
- [189] F. GEBHARD, *The Mott Metal-Insulator Transition*, Springer Verlag, 1997.
- [190] A. MILLER UND E. ABRAHAMS, Impurity Conduction at Low Concentrations, *Phys. Rev.* **120** (1960), 745–755.
- [191] N. F. MOTT UND E. A. DAVIS, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, Oxford University Press, 1979.
- [192] N. F. MOTT, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor & Francis, 1990.
- [193] D. K. PAUL UND S. S. MITRA, Evaluation of Mott’s Parameters for Hopping Conduction in Amorphous Ge, Si, and Se-Si, *Phys. Rev. Lett.* **31** (1973), 1000–1003.
- [194] I. P. ZVYAGIN, I. A. KUROVA UND N. N. ORMONT, Variable range hopping in hydrogenated amorphous silicon, *phys. stat. sol. (c)* **1** (2004), 101–104.

- [195] K. BÖHRINGER, G. MÜLLER UND S. KALBITZER, On the Variation of Hopping Transport in Amorphous Silicon with Preparation Conditions, *Z. Phys. B* **46** (1982), 301–304.
- [196] S. B. CONCARI, R. H. BUITRAGO, M. T. GUTIERREZ UND J. J. GANDIA, Electronic transport mechanism in intrinsic and p-doped microcrystalline silicon thin films, *J. Appl. Phys.* **94** (2003), 2417–2422.
- [197] C. GODET, Variable range hopping revisited: the case of an exponential distribution of localized states, *J. Non-Cryst. Solids* **299–302** (2002), 333–338.
- [198] B. I. SHKLOVSKII UND A. L. EFROS., *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Springer, Berlin, 1984.
- [199] F. FINGER, J. MÜLLER, C. MALTEN, R. CARIUS UND H. WAGNER, Electronic properties of microcrystalline silicon investigated by electron spin resonance and transport measurements, *J. Non-Cryst. Solids* **266–269** (2000), 511–518.
- [200] C. HERRING, N. M. JOHNSON UND C. G. VAN DE WALLE, Energy levels of isolated interstitial hydrogen in silicon, *Phys. Rev. B* **64** (2001), 125209/1–27.
- [201] K. IRMSCHER, H. KLOSE UND K. MAASS, Hydrogen-related deep levels in proton-bombarded silicon, *J. Phys. C* **17** (1984), 6317–6329.
- [202] B. HOLM, K. B. NIELSEN UND B. B. NIELSEN, Deep state of hydrogen in crystalline silicon: Evidence for metastability, *Phys. Rev. Lett.* **66** (1991), 2360–2363.
- [203] N. M. JOHNSON, C. HERRING UND C. G. VAN DE WALLE, Inverted order of acceptor and donor levels of monatomic hydrogen in silicon, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994), 130–133.
- [204] C. G. VAN DE WALLE, P. J. H. DENTENEER, Y. BAR-YAM UND S. T. PANTELIDES, Theory of hydrogen diffusion and reactions in crystalline silicon, *Phys. Rev. B* **39** (1989), 10791–10808.
- [205] J. I. PANKOVE, D. E. CARLSON, J. E. BERKEYHEISER UND R. O. WANCE, Neutralization of Shallow Acceptor Levels in Silicon by Atomic Hydrogen, *Phys. Rev. Lett.* **51** (1983), 2224–2225.

- [206] J. I. PANKOVE, R. O. WANCE UND J. E. BERKEYHEISER, Neutralization of acceptors in silicon by atomic hydrogen, *Appl. Phys. Lett.* **45** (1984), 1100–1102.
- [207] N. M. JOHNSON, C. HERRING UND D. J. CHADI, Interstitial hydrogen and neutralization of shallow-donor impurities in single-crystal silicon, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986), 769–772.
- [208] K. J. CHANG UND D. J. CHADI, Diatomic-Hydrogen-Complex Diffusion and Self-Trapping in Crystalline Silicon, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989), 937–940.
- [209] S. B. ZHANG UND W. B. JACKSON, Formation of extended hydrogen complexes in silicon, *Phys. Rev. B* **43** (1991), 12142–12145.
- [210] C. G. VAN DE WALLE, Chapter 6: Hydrogen Interactions with Polycrystalline and Amorphous Silicon – Theory, In *Hydrogen in Semiconductors II*, N. H. Nickel, Hrsg., Bd. 61 d. Reihe *Semiconductors and Semimetals*. Elsevier, 1999, S. 241–281.
- [211] A. W. R. LEITCH, V. ALEX UND J. WEBER, Raman Spectroscopy of Hydrogen Molecules in Crystalline Silicon, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998), 421–424.
- [212] W. JACKSON UND S. ZHANG, Hydrogen complexes in hydrogenated silicon, *Physica B* **170** (1991), 197–200.
- [213] N. M. JOHNSON, C. HERRING, C. DOLAND, J. WALKER, G. B. ANDERSON UND F. PONCE, Hydrogen-Induced Platelets in Silicon: Separation of Nucleation and Growth, *Mater. Sci. Forum* **83–87** (1992), 33–38.
- [214] N. H. NICKEL, G. B. ANDERSON, N. M. JOHNSON UND J. WALKER, Nucleation of hydrogen-induced platelets in silicon, *Phys. Rev. B* **62** (2000), 8012–8015.
- [215] J. MICHEL UND L. C. KIMERLING, Chapter 7: Electrical Properties of Oxygen in Silicon, In *Oxygen in Silicon*, F. Shimura, Hrsg., Bd. 42 d. Reihe *Semiconductors and Semimetals*. Academic Press, San Diego, 1994, S. 251–287.
- [216] W. KAISER, H. L. FRISCH UND H. REISS, Mechanism of the Formation of Donor States in Heat-Treated Silicon, *Phys. Rev.* **112** (1958), 1546–1554.

- [217] D. WRUCK UND P. GAWORZEWSKI, Electrical and infrared spectroscopic investigations of oxygen-related donors in silicon, *phys. stat. sol. (a)* **56** (1979), 557–564.
- [218] L. C. KIMERLING UND J. L. BENTON, Oxygen-related donor states in silicon, *Appl. Phys. Lett.* **39** (1981), 410–412.
- [219] A. OURMAZD, W. SCHRÖTER UND A. BOURRET, Oxygen-related thermal donors in silicon: A new structural and kinetic model, *J. Appl. Phys.* **56** (1984), 1670–1681.
- [220] A. R. BROWN, M. CLAYBOURN, R. MURRAY, P. S. NANDHRA, R. C. NEWMAN UND J. H. TUCKER, Enhanced thermal donor formation in silicon exposed to a hydrogen plasma, *Semicond. Sci. Technol.* **3** (1988), 591–593.
- [221] R. MURRAY, A. R. BROWN UND R. C. NEWMAN, Enhanced thermal donor formation and oxygen diffusion in silicon exposed to a hydrogen plasma, *Mat. Sci. Engineering B* **4** (1989), 299–302.
- [222] M. STAVOLA UND S. J. PEARTON, Chapter 3: Hydrogenation of Defects in Crystalline Silicon, In *Hydrogen in Semiconductors*, J. I. Pankove und N. M. Johnson, Hrsg., Bd. 34 d. Reihe *Semiconductors and Semimetals*. Academic Press, San Diego, 1991, S. 35–48.
- [223] R. C. NEWMAN, Chapter 8: Diffusion of Oxygen in Silicon, In *Oxygen in Silicon*, F. Shimura, Hrsg., Bd. 42 d. Reihe *Semiconductors and Semimetals*. Academic Press, San Diego, 1994, S. 289–352.
- [224] A. S. GROVE, B. E. DEAL, E. H. SNOW UND C. T. SAH, Investigation of thermally oxidised silicon surfaces using metal-oxide-semiconductor structures, *Solid-State Electron.* **8** (1965), 145–163.
- [225] S. DAUWE, *Low-Temperature Surface Passivation of Crystalline Silicon and its Application to the Rear Side of Solar Cells*, Dissertation, Universität Hannover, 2004.
- [226] E. M. MORENO, *Kinetics of charge carriers in Si/SiN_x heterojunctions*, Dissertation, Freie Universität Berlin, 2009.

- [227] J. R. ELMIGER UND M. KUNST, Investigation of charge carrier injection in silicon nitride/silicon junctions, *Appl. Phys. Lett.* **69** (1996), 517–519.
- [228] R. HEZEL UND R. SCHÖRNER, Plasma Si nitride – A promising dielectric to achieve high-quality silicon MIS/IL solar cells, *J. Appl. Phys.* **52** (1981), 3076–3079.
- [229] T. JANA, S. MUKHOPADHYAY UND S. RAY, Low temperature silicon oxide and nitride for surface passivation of silicon solar cells, *Sol. Energ. Mat. Sol.* **71** (2002), 197–211.
- [230] M. KUNST, O. ABDALLAH UND F. WÜNSCH, Passivation of silicon by silicon nitride films, *Sol. Energ. Mat. Sol.* **72** (2002), 335–341.
- [231] D. H. KOROWICZ, P. V. KELLY, K. F. MONGEY UND G. M. CREAN, Surface charge analysis characterisation of ultraviolet-induced damage in silicon nitride dielectrics, *Appl. Surf. Sci.* **168** (2000), 304–306.
- [232] H. GUO, W. MAUS-FRIEDRICHS, V. KEMPTER UND J. SHI, A study of the charging phenomena during electron irradiation of sintered Si_3N_4 , *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **173** (2001), 463–469.
- [233] W. A. LANFORD UND M. J. RAND, The hydrogen content of plasma-deposited silicon nitride, *J. Appl. Phys.* **49** (1978), 2473–2477.
- [234] I. JONAK-AUER, R. MEISELS UND F. KUCHAR, Determination of the hydrogen concentration of silicon nitride layers by Fourier transform infrared spectroscopy, *Infrared Phys. Technol.* **38** (1997), 223–226.
- [235] S. WINDERBAUM, F. YUN UND O. REINHOLD, Application of plasma enhanced chemical vapor deposition silicon nitride as a double layer antireflection coating and passivation layer for polysilicon solar cells, *J. Vac. Sci. Technol. A* **15** (1997), 1020–1025.
- [236] A. G. ABERLE, Overview on SiN surface passivation of crystalline silicon solar cells, *Sol. Energ. Mat. Sol.* **65** (2001), 239–248.
- [237] F. DUERINCKX UND J. SZLUFCHIK, Defect passivation of industrial multicrystalline solar cells based on PECVD silicon nitride, *Sol. Energ. Mat. Sol.* **72** (2002), 231–246.

- [238] C. BOEHME UND G. LUCOVSKY, H loss mechanism during anneal of silicon nitride: Chemical dissociation, *J. Appl. Phys.* **88** (2000), 6055–6059.
- [239] C. BOEHME UND G. LUCOVSKY, Dissociation reactions of hydrogen in remote plasma-enhanced chemical-vapor-deposition silicon nitride, *J. Vac. Sci. Technol. A* **19** (2001), 2622–2628.
- [240] F. JIANG, M. STAVOLA, A. ROHATGI, D. KIM, J. HOLT, H. ATWATER UND J. KALEJS, Hydrogenation of Si from SiN_x(H) films: Characterization of H introduced into the Si, *Appl. Phys. Lett.* **83** (2003), 931–933.
- [241] S. KLEEKAJAI, F. JIANG, M. STAVOLA, V. YELUNDUR, K. NAKAYASHIKI, A. ROHATGI, G. HAHN, S. SEREN UND J. KALEJS, Concentration and penetration depth of H introduced into crystalline Si by hydrogenation methods used to fabricate solar cells, *J. Appl. Phys.* **100** (2006), 093517/1–7.
- [242] M. SHEORAN, D. S. KIM, A. ROHATGI, H. F. W. DEKKERS, G. BEAUCARNE, M. YOUNG UND S. ASHER, Hydrogen diffusion in silicon from plasma-enhanced chemical vapor deposited silicon nitride film at high temperature, *Appl. Phys. Lett.* **92** (2008), 172107/1–3.
- [243] M. STAVOLA, S. KLEEKAJAI, L. WEN, C. PENG, V. YELUNDUR, A. ROHATGI, L. CARNEL UND J. KALEJS, IR characterization of hydrogen in crystalline silicon solar cells, *Physica B* **404** (2009), 5066–5070.
- [244] J.-W. CHEN UND A. G. MILNES, Energy levels in silicon, *An. Rev. Mater. Sci.* **10** (1991), 157–228.
- [245] G. BILGER, T. VOSS, T. SCHLENKER UND A. STROHM, High-temperature diffusion barriers from Si-rich silicon-nitride, *Surf. Interface Anal.* **38** (2006), 1687–1691.
- [246] Y. Z. WANG, S. J. FONASH, O. O. AWADELKARIM UND T. GU, Crystallization of a-Si:H on Glass for Active Layers in Thin Film Transistors, *J. Electrochem. Soc.* **146** (1999), 299–305.
- [247] Y. Z. WANG UND O. O. AWADELKARIM, Polycrystalline Silicon/Dielectric/Substrate Material Systems for Thin Film Transistor Applications: The Impact

of Material Properties on Transistors' Characteristics, *phys. stat. sol. (a)* **176** (1999), 885–909.

Veröffentlichungen und Konferenzbeiträge

Veröffentlichungen

- L.-P. SCHELLER, M. WEIZMANN, N. H. NICKEL UND B. YAN, Electrical transport in laser-crystallized polycrystalline silicon-germanium thin-films, *Appl. Phys. Lett.* **95** (2009), 062101/1–3
- M. WEIZMANN, L.-P. SCHELLER, N. H. NICKEL, K. LIPS UND B. YAN, Electron spin resonance in laser-crystallized polycrystalline silicon-germanium thin films, *phys. stat. sol. (a)* **207** (2010), 570–573
- P. DOGAN, F. FENSKE, L.-P. SCHELLER, K. Y. LEE, B. GORKA, B. RAU, E. CONRAD, S. GALL UND B. RECH, Structural and electrical properties of epitaxial Si layers prepared by e-beam evaporation, *Proceedings of the 22st European Photovoltaic Solar Energy Conference, Milan, Italy* (2007), 2019–2023
- P. DOGAN, B. GORKA, L.-P. SCHELLER, I. SIEBER, F. FENSKE UND S. GALL, Low temperature epitaxy of silicon using electron beam evaporation, *Proceedings of the 21st European Photovoltaic Solar Energy Conference, Dresden, Germany* (2006), 1060–1063

Konferenzbeiträge

- L.-P. SCHELLER, M. WEIZMANN, N. H. NICKEL UND B. YAN, Dangling-bond defects in laser-crystallized polycrystalline SiGe thin films, *25. International Conference on Defects in Semiconductors (ICDS)*, St. Petersburg, Russia (2009)
- L.-P. SCHELLER, M. WEIZMANN, N. H. NICKEL UND B. YAN, Electrical transport in undoped laser-crystallized polycrystalline silicon-germanium thin films, *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Dresden, Germany (2009)

- L.-P. SCHELLER, M. WEIZMANN, N. H. NICKEL, Electric transport properties of laser-crystallized polycrystalline silicon-germanium thin films, *45. Treffen des Arbeitskreises Punktdefekte*, Dresden, Germany (2008)
- L.-P. SCHELLER, M. WEIZMANN, N. H. NICKEL UND B. YAN, Grain boundary conduction in undoped laser-crystallized polycrystalline silicon-germanium thin films, *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Berlin, Germany (2008)
- L.-P. SCHELLER, M. WEIZMANN, N. H. NICKEL UND B. YAN, Metallic conduction in undoped laser-crystallized polycrystalline silicon-germanium thin films, *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Regensburg, Germany (2007)
- L.-P. SCHELLER, M. WEIZMANN, N. H. NICKEL UND B. YAN, Transport properties of laser-crystallized polycrystalline silicon-germanium thin films, *Material Research Society (MRS) Fall Meeting*, Boston, USA (2006)

Wissenschaftlicher Werdegang

2000	Abitur am Gabriele-von-Bülow Gymnasium in Berlin
2001 - 2007	Studium der Physik an der Technischen Universität Berlin
2006 - 2007	Diplomarbeit an der Technischen Universität Berlin in Kooperation mit dem Hahn-Meitner-Institut Berlin, Thema: "Transportuntersuchungen an laserkristallisierten Silizium-Germanium Legierungen"
2007	Diplom in Physik von der Technischen Universität Berlin
2007 - 2010	Doktorarbeit am Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie (vormals Hahn-Meitner-Institut Berlin) in Kooperation mit der Technischen Universität Berlin, Thema: „Ladungstransport in festphasenkristallisiertem polykristallinem Silizium“
2011	Promotion zum Dr. rer. nat. in Physik an der Technischen Universität Berlin

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die an der Durchführung dieser Arbeit sowohl direkt als auch indirekt beteiligt waren und so wesentlich zum Gelingen beigetragen haben. Im Speziellen danke ich

Prof. Dr. Norbert H. Nickel für seine Betreuung und die Möglichkeit, dieses interessante Thema in seiner Arbeitsgruppe bearbeiten zu können.

Prof. Dr. Michael Kneissl für sein Interesse und die Betreuung dieser Arbeit als Gutachter an der Technischen Universität Berlin.

Prof. Dr. W. Ted Masselink von der Humboldt-Universität zu Berlin für sein Interesse und seine Bereitschaft, sich als externer Gutachter zur Verfügung zu stellen.

Prof. Dr. Bernd Rech für die guten Arbeitsbedingungen am Helmholtz-Zentrum Berlin und die Möglichkeit, diese Arbeit in seinem Institut anfertigen zu können.

Dr. Moshe Weizman für die hervorragende Zusammenarbeit und die unzähligen wissenschaftlichen Diskussionen, die eine ständige Quelle für neue Ideen waren.

Dr. Marc Andy Gluba für die außerordentlich gute Zusammenarbeit während des gesamten Physikstudiums und seine langjährige Freundschaft.

Stefan Common und Tobias Sontheimer für die Unterstützung bei der Herstellung der untersuchten poly-Si Schichten.

Carola Klimm für die Durchführung von EBSD-Untersuchungen.

Peter Simon für die Durchführung von ESR-Untersuchungen.

Kerstin Jacob und Anja Scheu für die chemische Behandlung einiger Proben.

Marion Krusche für ihre Hilfe in formalen Angelegenheiten und die Überwindung aller bürokratischer Hürden.

Des weiteren bedanke ich mich bei allen übrigen Mitarbeitern des Instituts E-I1 für Silizium-Photovoltaik für die angenehme Arbeitsatmosphäre, die technische und wissenschaftliche Unterstützung und die nachmittäglichen Kaffeerunden sowie bei Dr. Jan Behrends, Dr. Felice Friedrich, Matthias Fehr, Benjamin Gorka, Stefan Common, Thomas Lufky und Martin Muske für viele interessante Diskussionen sowohl fachlicher als auch privater Natur.

Insbesondere aber danke ich meinen Eltern, die mir ein sorgenfreies Studium ermöglicht und mit ihrer Liebe und ihrem Beistand einen entscheidenden Beitrag zu dieser Arbeit geleistet haben. Meiner Schwester Silja danke ich für ihre moralische Unterstützung und ihre vielen aufmunternden Worte. Nicht zuletzt danke ich meiner Freundin Jessika für ihr Verständnis, ihre Geduld und die schöne Zeit abseits von Institut und Doktorarbeit.