

氏名(本籍)	梅 <sup>うめ</sup> 田 <sup>た</sup> 享 <sup>たか</sup> 英 <sup>ひで</sup> (茨城県)
学位の種類	博士(工学)
学位記番号	博甲第2,094号
学位授与年月日	平成11年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
学位論文題目	電子スピン共鳴法による水素化アモルファスシリコン中の局在中心の研究
主査	筑波大学併任教授 工学博士 田中一宜 (工業技術院産業技術融合領域研究所)
副査	筑波大学教授 理学博士 中尾憲司
副査	筑波大学教授 工学博士 川辺光央
副査	筑波大学教授 工学博士 長谷川文夫
副査	電子技術総合研究所部長 工学博士 荒井和雄

### 論文の内容の要旨

不純物のドーピングによってpn制御が可能な唯一のアモルファス半導体は水素化アモルファスシリコン(a-Si:H)であり、太陽電池やTFTに広く利用されている。本研究は、デバイス特性に致命的な影響を及ぼすa-Si:H中の主要な2つの局在中心の起源について、電子スピン共鳴法(ESR)を使ってその構造を解明しようとしたものである。

第2章では、a-Si:H試料と実験手法が詳述される。試料は、<sup>29</sup>Si超微細相互作用の精密解析を行うため、<sup>29</sup>Si存在比を、1.6, 4.7(自然), 9.1原子%に変えた無ドーブ試料、およびPドーブ(n型)、Bドーブ(p型)試料である。実験手法については、ESR基礎理論を含め、CW-ESR測定法、パルスESR測定法の特徴と詳細が記されている。

第3章は、本論文が研究対象とした2つのa-Si:Hの局在準位のうち、ダングリングボンド欠陥と言われているg=2.0055のESR中心に関する研究を記述したものである。欠陥の波動関数に関する情報は、ESRパラメータから得られる。諸パラメータは、粉末パターンとパラメータの不均一分布を仮定して理論的にスペクトルシミュレーションを行い、実験で得たスペクトルにフィッティングして決定される。従来と大きく異なるところは、<sup>29</sup>Si超微細分裂ラインの詳細な実験スペクトルをパルスESR法の導入によって初めて決定したこと、その実験スペクトルをもとに、ESR中心ラインと<sup>29</sup>Si超微細分裂ラインを含めて完全に理論シミュレーションによるフィッティングに成功したこと、マイクロ波周波数を変えて行った実験結果も総てフィッティングできたこと、等である。これにより、任意性を排したシミュレーションが完成し、1つのSi原子に局在したダングリングボンドの波動関数の性質が決定された。

第4章は、a-Si:Hバンド裾の局在電子のESR(光誘起ESR: LESR)中心に関する研究で、その波動関数と欠陥の構造が、精緻な実験スペクトル決定と詳細なシミュレーションから初めて明らかにされている。また、光の強さを変えて疑似フェルミ準位をシフトさせる実験と解析から、バンド裾状態のエネルギー依存性についても議論を展開している。

実験上の重要な発見は、光照射下における伝導体バンド裾の電子(g=2.004)と価電子帯バンド裾の正孔(g=2.01)の信号について、高磁場側のスペクトルの裾が前者の<sup>29</sup>Si超微細分裂のみによっていることを明らかに

したことであり、これにより、 $g=2.004$ 信号の波動関数が2つのSi原子に拡がっていることが解析の結果明らかになった。これは、a-Si:H中のSi-Si弱結合の存在を実験的に初めて証明したことになる。また、伝導帯バンド裾は指数関数的な変化ではなく、エネルギーに対して急峻に落ちていることが推論され、Si-Si弱結合の状態が自己束縛的な性質を持っていることが示唆された。ホトルミネサンスとの関連、ボンド長、SP混成比についても詳しく議論されている。

第5章では、研究結果の位置づけが試みられている。

## 審 査 の 結 果 の 要 旨

本研究は、水素化アモルファスシリコン (a-Si:H) 中の主要な2種類の局在準位の構造的起源をパルス電子スピンの共鳴法 (ESR) を使って解明したもので、学術的にも工学的にも非常に優れた内容と認められる。この分野において永く残る仕事であり、今後、多くの研究者に引用されることになろう。欠陥の物理として考えた場合、何故、自己束縛的な欠陥が形成されるのかは興味ある問題である。ランダム系であるためなのか、あるいは、水素の間接的な役割があるのか、今後に残された問題であろう。

よって、著者は博士(工学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。