



Wasserstoff in Zinkoxid

N. H. Nickel*
HMI, Abt. Silizium-
Photovoltaik
nickel@hmi.de

* Der Vortrag wurde in
Vertretung von Herrn
Walther Fuhs gehalten
HMI
fuhs@hmi.de

Ein großer Nachteil für die Herstellung von undotiertem Zinkoxyd ist die Tatsache, dass dieser Halbleiter in der Regel eine hohe n-Typ Leitfähigkeit zeigt. Dieses Phänomen wurde bisher natürlichen Defekten, wie Sauerstoff- oder Zinkvakanz (O_V , Zn_V), oder O und Zn Zwischengitteratomen (O_i , Zn_i) zugeschrieben [1]. Eine theoretische Untersuchung, basierend auf Dichtefunktionaltheorie (LDA), hat gezeigt, dass die beobachtete hohe n-Typ Leitfähigkeit keinesfalls mit den charakteristischen Eigenschaften der natürlichen Defekte in ZnO erklärt werden kann [2]. Dieses Ergebnis deutet darauf hin, dass die n-Typ Leitfähigkeit durch den unbeabsichtigten Einbau von Verunreinigungen im ZnO verursacht wird.

Basierend auf „first-principles“ LDA Rechnungen wurde kürzlich vorgeschlagen, dass die üblicherweise beobachtete n-Type Leitfähigkeit durch den Einbau von Wasserstoffatomen verursacht wird [3]. Für Wasserstoff ist dieses Verhalten ungewöhnlich, da diese Atome in den meisten Halbleitern als Kompensationszentren eingebaut werden. Die theoretische Vorhersage von Van de Walle [3] wurde mittels Elektronenspinresonanz- und ENDOR- (Elektron-Nuclear-Double-Resonance) Messungen experimentell bestätigt [4]. Darüberhinaus zeigten temperaturabhängige Hall-effektmessungen, dass der Wasserstoffdonatorzustand (H^+) mit etwa 25 meV thermisch aktiviert ist. In kommerziell erhältlichen ZnO-Einkristallen wurde eine H-Donatorkonzentration von $\approx 6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ gemessen [4].

Wasserstoffeffusionsmessungen an kommerziell erhältlichen ZnO-Einkristallen zeigen eindeutig, dass in diesen Proben tatsächlich eine H-Konzentration von etwa $5\text{-}6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

vorliegt [5]. Eine weitaus höhere Wasserstoffkonzentration findet man in gesputterten ZnO-Schichten. Unabhängig von der Dotierung (undotiert oder 2 at. % Al) wird in diese ZnO-Schichten eine H-Konzentration von etwa $0.5\text{-}3.4 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ eingebaut.

Da es experimentell und theoretisch erwiesen ist, dass Wasserstoff in ZnO als flacher Donator eingebaut wird, stellt sich die Frage, welchen Einfluss H auf die elektrischen Eigenschaften der gesputterten ZnO-Schichten hat. Um diese und ähnliche Fragen, wie zum Beispiel die Realisierung von p-Typ ZnO, zu beantworten, lohnt sich ein Blick auf die Entwicklung und Erforschung von ZnO basierenden optoelektronischen Bauelementen.

Literatur

- [1] D. C. Look, J. W. Hemsky, and J. R. Sizelove, Phys. Rev. Lett. 82, 2552 (1999).
- [2] A. F. Kohan, G. Ceder, D. Morgan, and C. G. Van de Walle, Phys. Rev. B 61, 15019 (2000).
- [3] C. G. Van de Walle, Phys. Rev. Lett. 85, 1012 (2000).
- [4] D. M. Hofmann, A. Hofstaetter, F. Leiter, H. Zhou, F. Henecker, B. K. Meyer, S. B. Orlinskii, J. Schmidt, and P. G. Baranov, Phys. Rev. Lett. 88, 045504-1 (2002).
- [5] N. H. Nickel and K. Fleischer, Phys. Rev. Lett. submitted (2002).