

非晶硅碳(a-SiC:H)薄膜光学常数的透射谱表征*

胡志华^{1,2} 廖显伯¹

(1 中国科学院半导体研究所凝聚态物理中心 表面物理国家重点实验室, 北京 100083)

(2 云南师范大学太阳能研究所, 昆明 650092)

摘要: 报道了一种用透射谱数据分析法计算非晶硅碳薄膜的厚度、折射率、吸收系数和光学带隙等光学常数的方法和程序. 这一方法引用有效谐振子模型理论的折射率色散关系, 所有公式均为解析表达式, 便于进行数据处理, 无须专用软件, 使用 Excel 即可完成, 适用于多种半导体薄膜材料. 将这种方法应用于 PECVD 方法制备的非晶硅碳(a-SiC:H)薄膜, 对其光学特性进行了分析.

关键词: 光学常数; 透射谱; 非晶硅碳薄膜

PACC: 7865M; 4230N; 4210J

中图分类号: TN304.2⁺4

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2005)01-0034-04

1 引言

氢化非晶硅碳(a-SiC:H)合金是一种带隙可调节、机械强度和化学稳定性好的新型功能材料. 因其在大面积电子器件中具有潜在应用价值, 这种材料的研究受到广泛重视^[1~5].

在器件应用中, 关键是需要知道 a-SiC:H 的光学常数和光学带隙. Swanepoel^[6,7] 曾经报道过用透射谱数据确定氢化非晶硅(a-Si:H)薄膜厚度和吸收系数的数学方法. 但 Swanepoel 所用的折射率色散关系 $n(\omega)$ 在物理上是没有意义的函数.

本文在 Swanepoel 的基础上, 发展了一种利用透射谱数据求解包括光学带隙 (E_g) 在内的诸多光学常数的实用程序. 这一方法可以计算出低吸收区的吸收系数, 从而得到关于带隙间缺陷态密度的分布信息, 而这些信息通常只能通过恒定光电导法 (CPM) 或热光偏转谱 (TPDS) 等方法才能获得. 本文在 Swanepoel 的基础上引用了建立在有效谐振子理论模型基础上的折射率色散关系, 这一公式被证实符合上百种化合物半导体^[8], 尤其是非晶半导体^[9].

将这一具有明确物理意义的函数关系应用于数值拟合, 从长波区外推到接近带边吸收的短波区, 从而用 Tauc 图确定光学带隙.

2 光学模型

用于透射谱测量的样品是沉积在 7059 透明玻璃上的薄膜, 如图 1 所示. 设薄膜厚度为 d ; 复数折射率为 $n = n - ik$, 其中 n 为实数折射率, k 为消光系数, 薄膜的吸收系数表示为 $\alpha = 4\pi k / \lambda$. 透明玻璃衬底的厚度远远大于薄膜厚度, 衬底玻璃的折射率表示为 s , 吸收系数 $\alpha_s = 0$. 周围环境空气的折射率 $n_0 = 1$. 当近乎垂直的入射光照射到薄膜面时, 光在界面上进行多重折射和反射, 反射光束和透射光束得到随波长分布的干涉谱. 对于有限厚度透明衬底, 将所有次级反射均考虑在内, 图 1 所示结构的透过率的严格表达式为^[6]:

$$T = \frac{A x}{B - C x + D x^2} \quad (1)$$

其中 $A = 16s(n^2 + k^2)$, $B = [(n+1)^2 + k^2][n(n+1)(n+s^2) + k^2]$; $C = (n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2)$

* 国家重点基础研究发展计划资助项目 (批准号: G2000028201)

2003-12-20 收到, 2004-02-26 定稿

$- 2k^2(s^2 + 1) J_2 \cos \quad - k[2(n^2 - s^2 + k^2) + (s^2 + 1)(n^2 - 1 + k^2) J_2 \sin \quad , D = [(n - 1)^2 + k^2][(n - 1)(n - s^2) + k^2]; x = \exp[-() d]$. 干涉的信息包含在系数 C 中, 即 \cos 和 \sin 两项, $= 4 nd/$ 表示厚度为 d 的薄膜所产生的位相差.

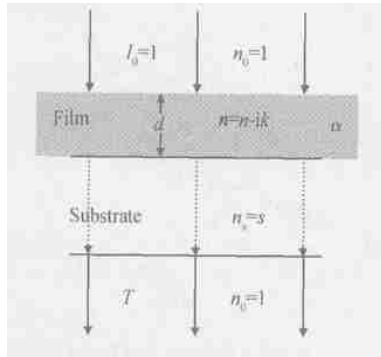


图 1 用于透射谱测量的样品光学示意图

Fig.1 Schematic configuration of an absorbing thin film on transparent substrate for transmission measurement

在长波区, k 接近于零, T 可近似为:

$$T = \frac{Ax}{B - Cx \cos + Dx^2} \quad (2)$$

其中 $A = 16sn^2; B = (n + 1)^3(n + s^2); C = 2(n^2 - 1) \times (n^2 - s^2); D = (n - 1)^3(n - s^2)$.

透过率的极值为:

$$T_{M(m)} = \frac{Ax}{B \mp Cx + Dx^2} \quad (3)$$

式中 \mp 分别对应透射极大包络线 (T_M) 和透射极小包络线 (T_m). 由此可以导出长波区的折射率表达式:

$$n = \sqrt{Y + \sqrt{(Y^2 - s^2)}} \quad (4)$$

式中 $Y = 2s(T_M - T_m) / (T_M T_m) + (s^2 + 1)/2$. 在长波段, 相邻极大或相邻极小的折射率相差不大, 相干级数 j 可以近似地由 $j_j = (j + 1)_{j+1}$ 求出. 相干极大对应整数, 相干极小对应半整数. 只要实测谱图中最长波段极值的 n 和 j 确定, 薄膜厚度 d 和短波方向极值的 $n()$ 即可通过干涉判据

$$2nd = j_j \quad (5)$$

求得. 同时, 由于 $x = \exp[-() d]$, 且 x 可表示为:

$$x = \frac{N_{M(m)} - \sqrt{[N_{M(m)}^2 - (n^2 - 1)^3(n^2 - s^4)]}}{(n - 1)^3(n - s^2)} \quad (6)$$

式中 $N_{M(m)} = 8n^2s / (T_{M(m)} \pm (n^2 - 1)(n^2 - s^2))$. \pm 分别对应 $N_M(T_M)$ 和 $N_m(T_m)$. 这样低吸收区的

吸收系数 $()$ 可通过求解 (6) 式获得.

至此, 薄膜厚度 d , 长波区的折射率 n 和吸收系数 $()$ 都已求出. 接下来是如何求解接近带边的短波区的吸收系数, 从而确定光学带隙 E_g . 为此我们必须首先知道短波区的折射率. 根据有效单谐振子理论, 折射率 n 和光子能量 h 有如下关系式:

$$n^2 - 1 = \frac{E_d E_{osc}}{E_{osc}^2 - (h)^2} \quad (7)$$

式中 E_{osc} 是谐振子能量; E_d 是色散能. 这一关系式对大多数共价键、离子键化合物以及液体物质都适用. 用 (7) 式拟合长波区极值点得到的 n 值并外推到吸收越来越强, 干涉逐渐消失的短波区. 在短波区, n 很大, $x \ll 1$, T_M 和 T_m 归一为一条曲线, x 可以表达为:

$$x = \frac{(n + 1)^3(n + s^2)}{16n^2s} T \quad (8)$$

用 (8) 式即可求出强吸收区 (带边) 的吸收系数 $()$ 进而通过 $Tauc^{[10]}$ 作图法确定光学带隙 E_g .

3 结果与讨论

本文用于测试的样品是用等离子体气相化学沉积 (PECVD) 方法在 7059 玻璃 (折射率 $s = 1.533$) 衬底上沉积的氢化非晶硅碳合金薄膜. 沉积时的衬底温度、气压和放电功率密度分别为 350, 10Pa 和 0.5W/cm². 调节甲烷气流浓度 R_C ($[CH_4] / [CH_4 + SiH_4]$) 和氢稀释比 R_H ($[H_2] / [CH_4 + SH_4]$), 对样品 SiC1202 和 SiC1211 的 R_C, R_H 分别为 1, 0.98 和 12, 0.64. 透射谱是用 Shimadzu-3101PC 型 UV-VIS-NIR 扫描分光光度计在 300 ~ 1500nm 波段以 120nm/min 速度测量的. 图 2 所示为 SiC1202 的实测透射谱图.

在进行数据处理之前, 必须首先从谱图上读出最长波区的两个或三个临近极值点的对应波长和透过率, 并在透射谱的极值包络线上读出这些极值点相应的 T_M 和 T_m . 将衬底折射率 $s = 1.533$ 和从谱图中读出的 T_M 和 T_m 代入公式 (4) 即可求出该波长对应的折射率 n . 在长波区, 相邻极大或相邻极小的折射率相差不大, 相干级数 j 可以近似地由 $j_j = (j + 1)_{j+1}$ 求出. 相干极大对应最近的整数, 相干极小对应最近的半整数. 折射率 n 和相干级数 j 确定以后, 薄膜厚度 d 就可通过 (5) 式求出. 反过来用薄膜厚度 d 和相干级数 j 求出各极值折射率 $n(j)$.

图 3 中的空心圆点表示实际求出的极值折射率, 实线是用有效单谐振子模型 (7) 式拟合的结果. 可以看出, 理论和实验符合得很好. 拟合还可得到振

子能量 E_{osc} 和色散能量 E_d .

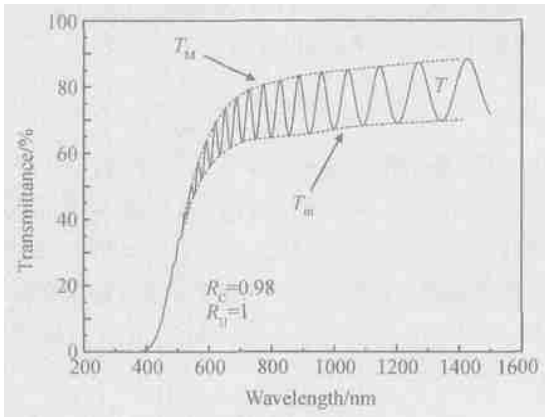


图2 SiC1202 的实测透射谱 T 虚线为文中所述极大 (T_M) 极小 (T_m) 包络线.

Fig. 2 Measured transmission spectrum T of sample 1202 and it's envelopes T_M, T_m according to the text

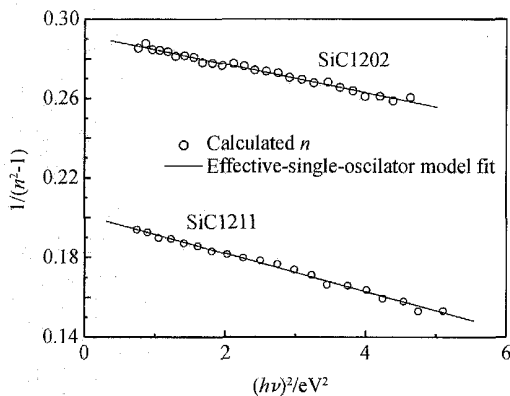


图3 用有效谐振子模型 [(7) 式] 拟合氢化非晶硅碳 a -SiC H 薄膜的折射率色散关系

Fig. 3 Comparison of the experimental data of $n()$ for two a -SiC H samples of SiC1202 and SiC1211 with the effective single-oscillator mode

拟合得到 $n()$ 关系之后,弱吸收区和强吸收区的吸收系数用 (6) 和 (8) 式求出. SiC1202 和 SiC1211 的吸收系数如图 4 所示. 从图中可以看出,薄膜的吸收谱可分为三个区域:(1)带间吸收区;(2)带边指数吸收区;(3)深能级缺陷吸收区.

对于带间吸收区,光学带隙 E_g 可以通过如图 5 所示的 Tauc 图确定. 实际求得 SiC1202 和 SiC1211 的光学带隙 E_g 分别为 2.45 和 2.13eV,明显高于氢化非晶硅 (a -Si H, 1.72eV) 的光学带隙. 根据带边指数吸收区得到的信息,还可估算出薄膜的 Urbach 能量 E_0 . 经过估算, SiC1202 和 SiC1211 的 Urbach 能量

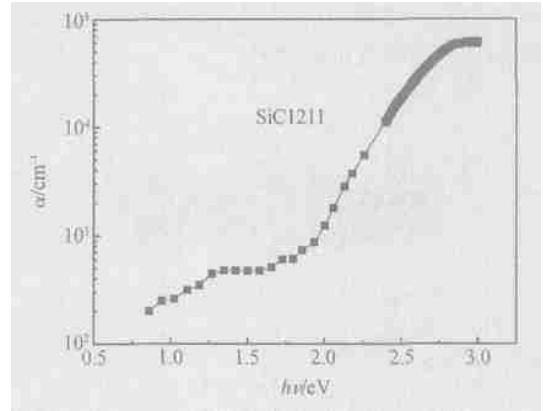


图4 计算所得氢化非晶硅碳薄膜的吸收系数

Fig. 4 Calculated absorption spectrum of hydrogenated silicon carbide films

E_0 分别为 0.15 和 0.11eV,比氢化非晶硅高出近两个数量级. 所得光学参数如表 1 所示.

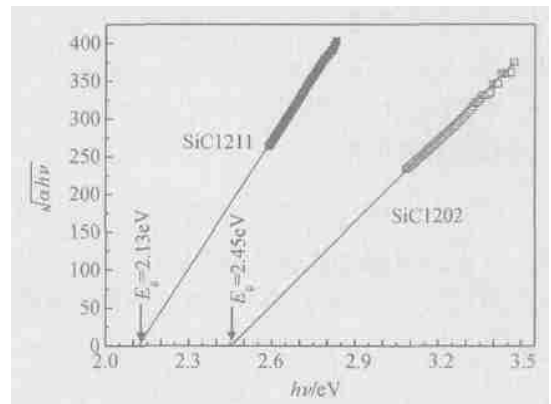


图5 Tauc 图确定的光学带隙 E_g

Fig. 5 Tauc's plot for determination of optical band gap E_g

表 1 氢化非晶硅碳 a -SiC H 的沉积条件和光学常数

Table 1 Deposition conditions and retrieved optical parameters of concerned samples

Sample	Deposition condition		Retrieved optical parameters			
	R_C	R_H	d/ nm	E_g/ eV	E_{osc}/ eV	E_d/ eV
1202	0.98	1	2684	2.45	6.4	21.8
1211	0.64	12	1450	2.13	4.6	22.9

理论模型假设各界面为理想平面,而实际衬底和薄膜表面严格说来都是粗糙的,或是不均匀的. 这种粗糙表面或界面会给测量和分析带来误差. 同时,由于薄膜生长过程中也存在涨落起伏,沿薄膜厚度方向亦是不均匀的. 特别是在界面处于生长初期时,其微结构以及光学特性同后续生长的薄膜主体存在

一定差别,这也是可能导致误差的因素.因此,本文提出的数据处理方法一般只适合于薄膜相对较厚(接近或超过 1 μ m)的情况.

4 结论

本文报道了运用透射谱数据分析半导体薄膜光学特性的方法和计算程序.所引用的折射率色散关系具有明确的物理意义,所有计算都有明确严谨的数学表达式.只用透射谱数据,即可求出薄膜厚度折射率、吸收系数和光学带隙等一系列光学特性参数.实际应用中无须专用程序,使用 Excel 即可完成.本文将成功用于分析 PECVD 制备的氢化非晶硅碳薄膜.这种方法同样适用于其他非晶或多晶薄膜半导体.

参考文献

- [1] Roe KJ, Katulka G, Kolodzey J, et al. Silicon carbide and silicon carbide:germanium heterostructure bipolar transistors. *Appl Phys Lett*, 2001, 78:2073
- [2] Mütze F, Seibel K, Schneider B, et al. UV imager in TFA technology. Presented at Materials Research Society (MRS) Spring Meeting, San Francisco, 1999
- [3] Wu D S, Hörng R H, Chan C C, et al. Plasma-deposited amorphous silicon carbide films for micromachined fluidic channels. *Appl Surf Sci*, 1999, 144/145:708
- [4] Aron M, Bolz A, Schaldach M. Improvement of stenting therapy with a silicon carbon coated tantalum stent. *J Mater Sci Mater In Medicine*, 1996, 72/73:278
- [5] Sarro P M, DeBoer C R, Körkmez E, et al. Low-stress PECVD SiC films for IC-compatible microstructures. *Sensors & Actuators A*, 1998, 67:175
- [6] Swanepoel R. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. *J Phys E*, 1983, 16:1214
- [7] Swanepoel R. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon. *J Phys E*, 1984, 17:896
- [8] Wemple S H, DiDomenico M. Behavior of electronic dielectric constant in covalent and ionic materials. *Phys Rev B*, 1971, 3:1338
- [9] Wemple S H. Refractive-index behavior of amorphous semiconductors and glasses. *Phys Rev B*, 1973, 7:3767
- [10] Ley L. *Topics in applied physics*. Berlin, Heidelberg, New York and Tokyo:Springer-Verlag Press, 1984:142

Optical Characterization of Hydrogenated Amorphous Silicon Carbide Films from Transmission Spectra *

Hu Zhihua^{1,2} and Liao¹ Xianbo

(1 State Key Laboratory for Surface Physics, Center for Condensed Matter Physics, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)

(2 Institute of Solar Energy, Yunnan Normal University, Kunming 650092, China)

Abstract: Simplified formulae and procedures are presented to compute thickness, refractive index, absorption coefficient, and optical Tauc's gap of a-SiC:H films by the transmission spectrum alone. An appropriate functional dependence of the refractive index on the wavelength, based on the single-effective-oscillator model, is given as a priori information of this reverse optical engineering process. All formulae are in closed form and the computations can be easily carried out on PC computer that is available in laboratories anywhere. The computation procedure has been successfully implemented for amorphous silicon carbide films prepared by PECVD.

Key words: optical constants; transmission spectrum; amorphous silicon carbide

PACC: 7865M; 4230N; 4210J

Article ID: 0253-4177(2005)01-0034-04

* Project supported by State Key Development Program for Basic Research of China (No. G2000028201)

Received 20 December 2003, revised manuscript received 26 February 2004