

用分光光度法研究非晶硅薄膜的光学性质

方晓玲,高斐,刘伟,王建军,晏春愉,张佳雯

(陕西师范大学 物理学与信息技术学院,西安 710062)

摘 要:提出了一种测量薄膜透射光谱的方法.该方法用自制的夹具改进了分光光度计,保证了在测量大小不同的样品时参考光的强度和入射到待测样品上光的强度相同.利用改进后的分光光度计测量了沉积在玻璃衬底上非晶硅薄膜的透射光谱,并对透射光谱进行了拟合和计算,确定出非晶硅薄膜的光学常量和厚度.

关键词:分光光度计;非晶硅薄膜;折射率;吸收系数

中图分类号:O484.5

文献标识码:A

文章编号:1004-4213(2008)09-1825-4

0 引言

非晶硅(a-Si:H)薄膜是一种很重要的光电材料.因其有合适的光学带隙,较大的可见光吸收系数等性能,在廉价太阳能电池、薄膜场效应管和光敏器件中有重要的应用^[1].用非破坏性方法确定它的光学参量和厚度是一个重要的研究课题.通过测量其透射光谱并对光谱进行分析以获得光学参量和厚度是较常采用的方法^[2-3].利用分光光度计测量薄膜的透射光谱简单方便^[4].但是,目前关于用分光光度计测量薄膜光学特性的详细实验未见报道.实际测量时,由于分光光度计的样品池和参比池的透光狭缝有一定的宽度及长度,样品大小及放置样品时的随机性,常常会导致样品接受光面积(强度)和参考光面积(强度)不等,引起较大的测量误差.为了准确地测量样品的透射光谱,必须确保两束入射光的强度相同.为此本文设计了一种模具来改进分光光度计,在参比池和样品池前的相同位置处分别加上一个相同的带孔夹具以控制两束光的照射面积(强度).并利用这种改进的分光光度计测量了 a-Si:H 薄膜的透射光谱,从而较准确地获得 a-Si:H 薄膜的光学参量.

1 实验

测试样品是用等离子体气相化学沉积(PECVD)方法在普通玻璃($n=1.51$)衬底上沉积 a-Si:H 薄膜.沉积时的衬底温度、气压分别为 300 °C, 90 Pa. 硅烷浓度为 1% ($[SiH_4]/[SiH_4 + H_2 + Ar]$),射频为 13.56 MHz,电极间距为 2 cm,沉积时间为 2 h.用 LAMBD950 型 UV-VIS-NIR 扫描分光光度计在 500~2 200 波段测量 a-Si:H 薄膜的

透射谱.

分光光度计的基本原理如图 1.光源发出的光被分为两束,分别通过参比池和样品池,再经载波器后被光电倍增管交换接收而转换成电信号,经模拟/数字转换而进入计算机内由一定的程序运算而得出样品的透射率、反射率及吸收率等光学特性.测量薄

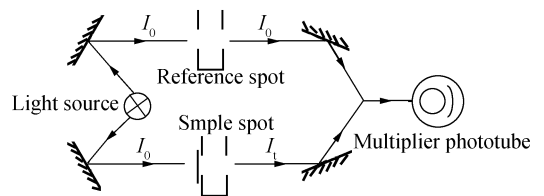


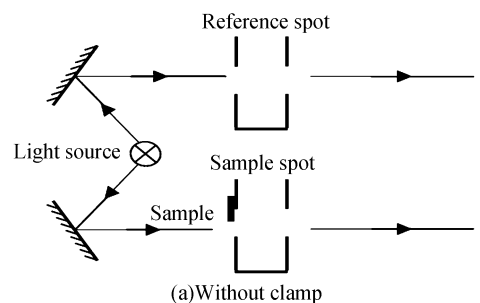
图 1 分光光度计基本原理

Fig. 1 Principle of spectrophotometer

膜材料的透射率时,首先在两光路上(或两个池上)不放置任何东西进行校正,然后将待测样品放在样品池前面的缝上(约 8 mm 宽,15 mm 高,如图 1),这样,样品的透射率可表示为

$$T = I_t / I_0 \tag{1}$$

实际测量中,由于样品的大小不一以及样品在样品池上粘结的位置随机性很大,对于较小的样品($<1 \times 1 \text{ cm}^2$),常常会造成一部分光未经过样品而直接透过(如图 2(a)),从而造成很大的测量误差.为此设计了两个同样的夹具,每个夹具上都有一个小孔($\Phi=5 \text{ mm}$),夹具夹在两个池的前面,使孔位于光斑的中心部分.这样测量样品的透射率时,只要将样品完全盖住样品池前面的夹具上的小孔(并夹



(a) Without clamp

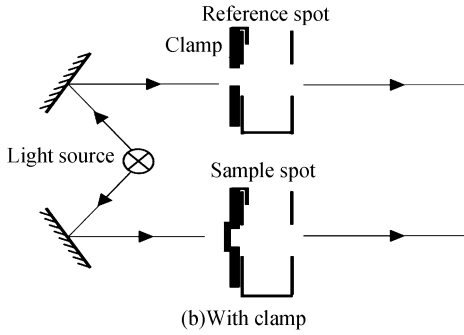


图2 未用夹具和用夹具的透射光谱测量

Fig. 2 Measurement of the transmission spectrum without clamp and with clamp

在夹具上),这样就保证了两束入射光具有相同的面积及能量,因而具有可比性,消除了前面所说的测量误差,如图2(b).

2 理论模型

如图3,设薄膜厚度为 d ,复折射率为 $n=n-ik$,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 $\alpha=4\pi k/\lambda^2$.透明玻璃衬底的厚度远远大于薄膜厚度,衬底玻璃的折射率为 s ,吸收系数 α_s ,周围空气的折射率 $n_0=1$.对于有限厚度透明衬底,将所有次级反射均考虑在内.图3结构的吸收薄膜

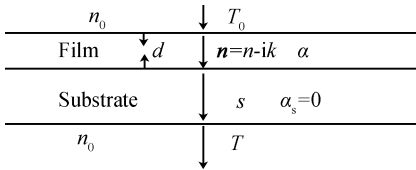


图3 a-Si:H 薄膜/玻璃的透射光谱分析

Fig. 3 Transmission spectroscopic analysis of a-Si:H film on glass substrate

$(n^2 \gg k^2)$ 透过率的严格表达式为^[5]

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

式中 $A=16n^2s$, $B=(n+1)^3(n+s^2)$, $C=2(n^2-1) \cdot (n^2-s^2)$, $D=(n-1)^3(n-s^2)$, $\varphi=4\pi nd/\lambda$, $x=\exp(-\alpha d)$.

在弱吸收区域,薄膜吸收很小,可将透射率的极值分别表示为

$$T_{\max} = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (3)$$

$$T_{\min} = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad (4)$$

式中 T_{\max} 、 T_{\min} 分别对应透射极大值和透射极小值,且假定它们均为波长 λ 的连续函数,对其进行三次样条插入拟合得到两条透射极值包络线.这样任意波长 λ 处均有一对相应的 T_{\max} 和 T_{\min} 与它对应.只要从透射极值包络线中读出极值点相应的 T_{\max} 、 T_{\min} 即可通过公式

$$n = N + (N^2 - s^2)^{\frac{1}{2}} \quad (5)$$

(式中 $N=2s(T_{\max}-T_{\min})/T_{\max}T_{\min}+(s^2+1)/2$)求出薄膜在不同的干涉级数 m 对应波长下的折射率 $n(\lambda)$.

根据干涉判据

$$2nd = m\lambda \quad (6)$$

可得到薄膜的厚度

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2(n_2 \lambda_1 - n_1 \lambda_2)} \quad (7)$$

式中 n_1 和 n_2 是与a-Si:H薄膜中两相邻波峰(或波谷)的波长 λ_1 和 λ_2 相对应的折射率.由于从式(7)推导出的膜厚很易受到波长和计算得到折射率误差的影响,因此偏离实际值会较大,需进行第二次运算^[6].把求出的薄膜厚度和对应的折射率带入式(6),得到一系列的干涉级数 m 值,调整 m ,使干涉极大对应整数,干涉极小对应半整数,且这一系列的 m 值为连续整数.把调整后的 m 值和相应的折射率再带入式(6),即可重新得到较为准确的膜厚.最后再把较准确的膜厚和调整后的 m 值带入式(6)计算不同极值点的折射率 $n(\lambda)$,这次得出的 $n(\lambda)$ 值就比较精确了.

知道 $n(\lambda)$ 值后,则式(2)中的 A 、 B 、 C 、 D 就可以计算出来,由此可得到

$$x = \frac{E_M - [E_M^2 - (n^2 - 1)^3(n^2 - s^4)]^{\frac{1}{2}}}{(n-1)^3(n-s^2)} \quad (8)$$

式中 $E_{\max}=8n^2s/T_{\max}+(n^2-1)(n^2-s^2)$.这样由式(8)便可求出 $x(\lambda)$,进而根据 $x=\exp(-\alpha d)$,可得到吸收系数 $\alpha(\lambda)$.

然而,在强吸收区域,由于吸收很大,透射强度急剧降低,使得谱中的两条极值包络线迅速靠近并归为一条曲线,导致上述计算方法失效.但该区域的折射率可根据弱吸收区获得的折射率 $n(\lambda)$ 值及Cauchy色散公式

$$n = a_1/\lambda^2 + a_2(\lambda \text{ 单位 nm}) \quad (9)$$

(式中 a_1 和 a_2 是由所研究的介质特性决定的常量)外推得到.

3 测量结果及分析

用分光光度计测量沉积在玻璃衬底上的非晶硅薄膜的透射光谱如图4.图中虚线为未用夹具时的测量结果,实线为使用夹具时的同一样品的测量结果.显然未用夹具时,物光中有一部分光未通过样品而直接到达光度计的光探测器上,导致透射率增加;使用夹具后,在强吸收区(<500 nm)透射率为零,与实际情况相符,说明使用夹具后消除了上述测量误差,得到了正确的透射光谱.

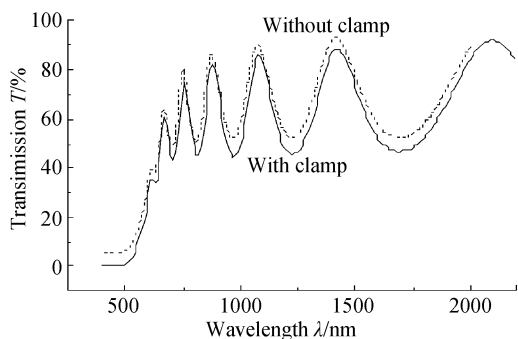


图4 a-Si:H薄膜/玻璃的透射光谱

Fig. 4 Transmission spectrum of a-Si:H film/glass

根据理论模型,利用极值的整数性得到了 a-Si:H 薄膜的厚度为 717 nm,均方差为 ±24 nm;运用最小二乘法拟合出 a-Si:H 薄膜的色散关系 $n=1.6 \times 10^5/\lambda^2 + 2.88$,与文献[7]报道的结果相似. a-Si:H 薄膜吸收系数可借助于经验公式

$$\lg \alpha = \frac{a_3}{\lambda^2} + a_4 \quad (\alpha \text{ 单位 } \text{nm}^{-1}) \quad (10)$$

(将弱吸收区计算得到的 $\alpha(\lambda)$ 值带入上式,用最小二乘法拟合出系数 a_3 、 a_4) 获得. 图 5 给出了 a-Si:H 薄膜吸收系数的计算结果. 从图中可以看出, a-Si:H 薄膜的吸收谱可分为三个区域: 1) 带间吸收

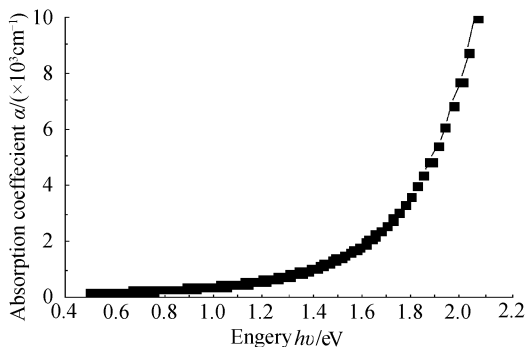


图5 a-Si:H薄膜吸收系数与光子能量的关系

Fig. 5 The relationship between absorption coefficient and photo energy of a-Si:H film

区 ($>1.8 \text{ eV}$); 2) 带边指数吸收区 ($1.4 \sim 1.8 \text{ eV}$); 3) 深能级缺陷吸收区 ($<1.4 \text{ eV}$). 在带间吸收区光子能量 E 大于光学能隙 E_g , 吸收系数与能量存在下式

$$\alpha(E) \propto (E - E_g)^r \quad (11)$$

根据式(11),可用 Tauc^[8]作图法确定光学能隙 E_g . 如图 6. 实际求得 a-Si:H 薄膜的光学带隙 E_g 为 1.56 eV,与 El-Naggar 等人的结果相近^[9].

将得到的 n 、 d 、 α 带入式(2)计算出 500~2 200 nm 波段内的透射率曲线,并与实验曲线进行了比较. 如图 7,实线代表实验曲线,虚线代表理论拟合曲线. 在 800~2 200 nm 波段内,实验值与计算值相吻合,而在 800 nm 以下,实验值与计算值有一定误差. 其主要原因是 a-Si:H 薄膜在该波段内吸收相对较大

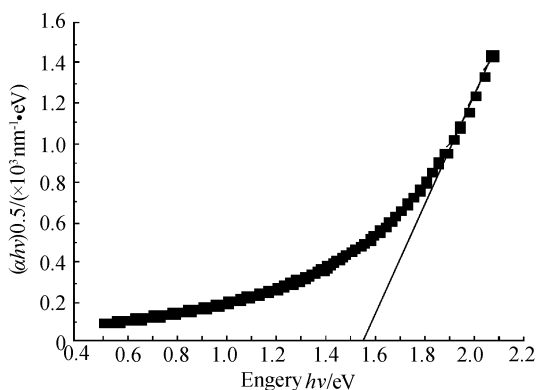


图6 Tauc图确定的光学带隙

Fig. 6 Determination of optical band gap from Tauc plot

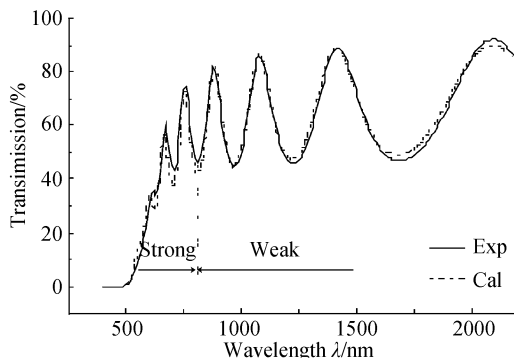


图7 a-Si:H薄膜的透射率曲线和拟合出的透射率曲线

Fig. 7 Measured and simulated transmission spectra of a-Si:H film

及薄膜非均匀性对实验测试曲线的影响^[10]. 然而,从整体上看理论值与实验值吻合较好.

4 结论

本文利用自制的夹具改进了 LAMBDA950 型 UV-VIS-NIR 分光光度计的装置,保证了在测量大小不同的样品时参考光的强度和入射到待测样品上光的强度相同,从而精确地测量了 a-Si:H 薄膜的透射光谱. 采用极值包络线分析方法计算了 a-Si:H 薄膜的透射光谱,得出了 a-Si:H 薄膜的折射率 n 、吸收系数 α 、厚度 d 以及光学能隙 E_g ,并将计算得到的透射率曲线与实验测量结果比较分析,结果表明,理论值与实验结果吻合较好. 因此,本文提出的方法可广泛应用于分光光度计测量薄膜的透射光谱.

参考文献

- [1] CHEN Zhi-ming. Amorphous semiconductor material and device[M]. Beijing: Science Press, 1991: 166-415. 陈治明. 非晶半导体材料和器件[M]. 北京: 科学出版社, 1991: 166-415.
- [2] CISNEROS J I. Optical characterization of dielectric and semiconductor thin films by use of transmission data[J]. *App Opt*, 1998, **37**(22): 5262-5270.
- [3] AQILI A K S, MAQSOOD A. Determination of thickness, refractive index, and thickness irregularity for semiconductor

- thin films from transmission spectra[J]. *Appl Opt*, 2002, **41**(1):214-218.
- [4] ZHONG Di-sheng, WANG Lu-chuan, YU Yin-zhi. Optical constants measurement of thin film by spectrophotometer[J]. *Journal of Liaoning University*, 1996, **23**(2):1-12.
钟迪生,王鲁川,于颖祉.用分光光度法测量薄膜的光学常量[J]. 辽宁大学学报, 1996, **23**(2):1-12.
- [5] SWANEPOEL R. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon[J]. *J Phys E : Sci Instrum*, 1983, **16**(12):1214-1222.
- [6] LI Dan, HE Yuan-hua, LIU Qing-ju. Study on optical properties of TiO₂ film[J]. *College Physics*, 2005, **24**(7):36-39.
李丹,何愿华,柳清菊. TiO₂ 薄膜光学性质的研究[J]. 大学物理, 2005, **24**(7):36-39.
- [7] SWANEPOEL R. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films[J]. *J Phys E :Sci Instrum*, 1984, **17**(10):896-903.
- [8] TAUC J, GRIGOROVICI R, VANCU A. Optical properties and electronic structure of amorphous germanium[J]. *Phys Status Solidi*, 1966, **15**(2):627-637.
- [9] EL-NAGGAR A M. Influence of thickness on the optical properties of vacuum-deposited a-Si : H films[J]. *Optical & Laser Technology*, 2001, **33**(4):237-242.
- [10] RICHARDS B S, LAMBERTZ A, SPROUL A B. Determination of the optical properties of non-uniformly thick non-hydrogenated sputtered silicon thin films on glass[J]. *Thin Solid Films*, 2004, **460**(1-2):247-255.

Optical Properties of Amorphous Silicon Film by Spectrophotometry

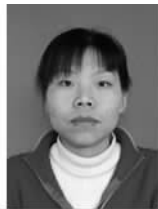
FANG Xiao-ling, GAO Fei, LIU Wei, WANG Jian-jun, YAN Chun-yu, ZHANG Jia-wen

(School of Physics and Information Technology, Shaanxi Normal University, Xi'an 710062, China)

Received date: 2007-05-28

Abstract: A method for measuring transmission spectrum of thin films is presented. The spectrophotometer was improved using a clamp, which ensures the same intensities for the reference light and the sample light when the samples with different sizes were measured. Transmission spectrum of a-Si : H film were measured by the modified spectrophotometer. The optical constants and thickness are obtained by spectrum curve fitting.

Key words: Spectrophotometer; Amorphous silicon film; Refractive index; Absorption coefficient



FANG Xiao-ling was born in 1979. She earned her B. S. degree in 2003 from Baoji University of Arts and Sciences. Now she is a M. S. degree candidate at Shaanxi Normal University. Her main research interests focus on photoelectron applications.