

# 溅射无定形硅的紫外-可见椭圆偏振 光谱和光学常数

陈树光 江任荣 莫党  
(中山大学物理系)

## 提 要

利用作者试制的紫外-可见椭圆偏振光谱仪研究了溅射无定形硅薄膜的光学性质, 获得了不同氢分压制备的无定形硅在紫外至可见光谱范围内的  $n \sim \lambda$ 、 $k \sim \lambda$  等关系, 并对结果进行了讨论。

## 一、引 言

确定吸收薄膜的折射率  $n$  和消光系数  $k$  是薄膜光学的重要内容之一。以前常采用测定样品反射率, 然后按 Kramers-Kronig 关系计算  $n$  和  $k$  值, 但这种方法需要波长范围很宽的反射率测量值, 而且计算复杂。近年来, 利用椭圆偏振光谱法研究吸收薄膜及大块样品的光学性质的工作已显著增多。已经发表的一些工作<sup>[1~8]</sup>表明, 椭圆偏振光谱法是研究薄膜和固体光学性质的重要手段。

无定形硅薄膜是当前廉价太阳能电池的重要材料, 它在紫外区具有重要的物理内容, 其吸收系数  $\alpha$ 、反射率  $R$ 、介电常数的实部  $\epsilon_1$  和虚部  $\epsilon_2$  等的峰值通常都出现在该谱区。为了研究无定形硅薄膜的光学性质, 本文利用自己设计和安装的一台紫外-可见椭圆偏振光谱仪, 在紫外至可见光的波长范围内对生长条件不同的射频溅射  $\alpha$ -Si:H 薄膜进行了测量。

## 二、样品制备

本文采用的无定形硅样品, 是由射频溅射法制备的。溅射是在国产 JS-450 高频溅射设备中进行, 该设备的最大射频输出功率为 3kW, 最高阳极电压为 6kV, 工作频率为 10~13.65MC, 聚焦磁场为 100 高斯, 用高纯硅单晶作靶子, 硅靶直径 80mm, 靶至衬底的距离为 30mm, 靶及衬底托盘均有水冷。通常以高纯 Ar 气作为工作气体, 为了在无定形硅中掺氢, 还可在 Ar 气中掺入某一分压的氢气。

溅射时, 工作气体的压强通常稳定在  $10^{-2} \sim 10^{-3}$  Torr 之间的某一数值, 阳极电压约为 3.5kV, 衬底采用玻璃及高纯单晶硅片。为了使计算简单, 制备的无定形硅薄膜的厚度远大于该波段内光的透入深度, 例如, 纯 Ar 溅射的样品, 厚度常取  $1 \mu\text{m}$  左右, 掺氢样品, 厚度适当增加。改变工作气体的压强及氢分压所占的比例, 便可得到一系列  $\alpha$ -Si:H 样品。为了减少样品表面的污染, 制备后立即进行测量。本文采用的样品, 其制备条件如表 1 所示。

收稿日期: 1983年3月9日; 收到修改稿日期: 1983年8月16日

表 1 溅射无定形硅样品制备条件

Table 1 Preparation conditions of sputtered amorphous silicon samples

样 品 编 号	阳 极 电 压 (kV)	工 作 室 压 强 (Torr)	氢分压所占比例 (%)	衬 底 材 料
I	3.5	$5 \times 10^{-3}$	15	单 晶 硅
II	3.5	$5 \times 10^{-3}$	10	单 晶 硅
III	3.5	$5 \times 10^{-3}$	2.5	玻 璃
IV	3.5	$5 \times 10^{-3}$	0	单 晶 硅
V	3.5	$1.5 \times 10^{-2}$	0	单 晶 硅

### 三、计算方法

采用旋转检偏器的椭圆偏振光谱法进行测量。在某一波长时,由光电流的极大值  $I_{\max}$ 、极小值  $I_{\min}$  及对应的检偏器方位角  $\theta_{\min}$ , 可以计算椭圆偏振参数  $\psi$  和  $\Delta$ <sup>[9,10]</sup>。当薄膜厚度远大于光的透入深度时,根据椭圆偏振参数的定义<sup>[11,12]</sup>,可以获得:

$$n^2 = k^2 + \sin^2 \varphi_1 \left[ 1 + \frac{\tan^2 \varphi_1 (\cos^2 2\psi - \sin^2 2\psi \sin^2 \Delta)}{(1 + \sin 2\psi \cos \Delta)^2} \right], \quad (1)$$

$$k^2 = \frac{\sin^2 \varphi_1 \tan^2 \varphi_1 \sin 4\psi \sin \Delta}{2n(1 + \sin 2\psi \cos \Delta)^2}, \quad (2)$$

式中,  $\varphi_1$  为单色光的入射角,通常取  $70^\circ$ 。由(1)、(2)式,可计算某一波长时吸收薄膜的  $n$ 、 $k$  值。改变波长,重复以上的测量和计算,便可获得一系列的  $\psi$ 、 $\Delta$  值,以及相应的  $n \sim \lambda$ 、 $k \sim \lambda$  关系。

### 四、实验结果及讨论

我们在  $2600 \sim 6000 \text{ \AA}$  的波长范围内测量了不同氢分压制备的无定形硅薄膜的光学常数,图 1 表示部分样品的  $n \sim \lambda$  曲线,由图可以看到,当波长由  $6000 \text{ \AA}$  开始逐渐向短波移动时,  $n$  缓慢上升,通过峰值后,便急剧下降。样品掺氢后,峰值波长略向短波偏移,并且峰的高度随氢分压的增加而下降。图 2 表示 Pieroe 等<sup>[6]</sup> 在高真空下用电子枪蒸发制备的无定形硅的  $n \sim \lambda$  曲线与我们样品 V 的比较,尽管两者制备方法和测试方法不同,其  $n \sim \lambda$  曲线仍很相似。样品 V 与样品 IV 都为纯 Ar 溅射,但溅射时具有不同的气体压强。已经知道,无定形硅的光学常数是对结构灵敏的量,样品的疏密程度,样品中缺陷的种类和性质,都会引起光学性质的变化。

根据  $\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}$ , 可由消光系数  $k$  求得某一波长的吸收系数  $\alpha$ 。图 3 为由此算得的  $\alpha$  和  $\lambda$  的关系。可以看到,当波长从  $6000 \text{ \AA}$  降至  $3000 \text{ \AA}$  时,吸收系数约增加一个数量级。另一方面,随着氢分压增加,吸收系数明显降低。然而,即使无定形硅掺氢后,吸收系数仍比单晶硅大,在可见光范围内,约大一个数量级。图 3 中的虚线表示 Pieroe 等的测量结果。

吸收系数随氢分压的增加而减少的现象,与无定形硅掺氢后能带结构的变化有关。近年来, B. von Roedern 等<sup>[13]</sup> 研究了无定形硅的光电子发射,指出氢掺入无定形硅中,将引

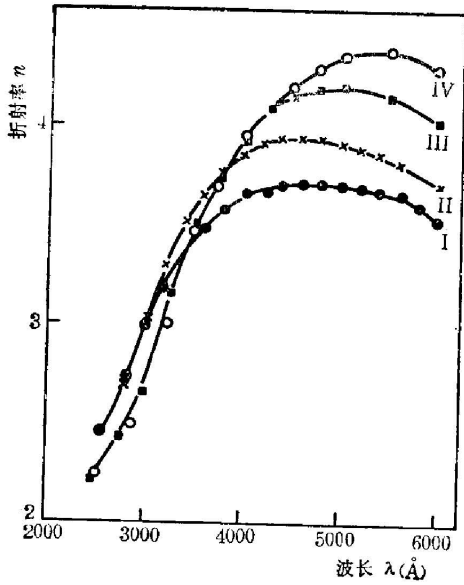


图 1 不同氢分压对  $n \sim \lambda$  曲线的影响  
Fig. 1 Influence of various hydrogen partial pressures on  $n \sim \lambda$  curves

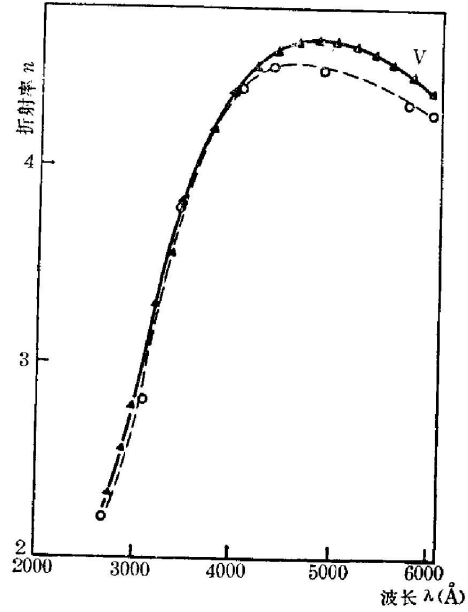


图 2 不同制备方法的无定形硅  $n \sim \lambda$  曲线的比较  
Fig. 2 Comparison of amorphous silicon  $n \sim \lambda$  curve of this work with the early result of Ref. [6]

▲ this work (samples prepared by sputtering)  
○ from [6] (samples prepared by evaporation)

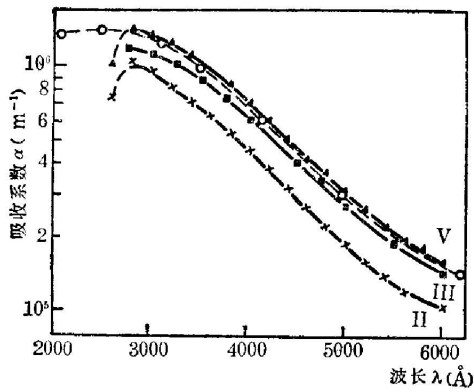


图 3 无定形硅吸收系数  $\alpha$  随波长  $\lambda$  的变化  
Fig. 3 Variation of the absorption coefficients  $\alpha$  of various amorphous silicon samples with the wavelengths  $\lambda$

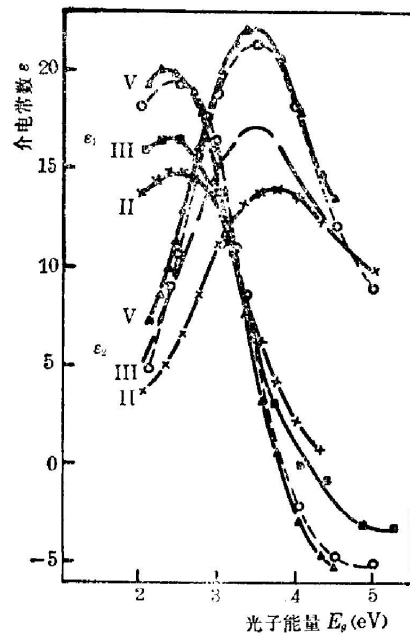


图 4 无定形硅介电常数  $\epsilon$  随光子能量  $E_p$  的变化  
Fig. 4 Variation of the dielectric constants  $\epsilon$  of various amorphous silicon samples with the photon energies  $E_p$

起价带顶向下移动,因而掺氢无定形硅的光学能隙  $E_0$  增加。我们由  $(h\nu)^{\frac{1}{2}} \propto h\nu$  的函数关系,也能求出光学能隙  $E_0$ <sup>[6]</sup>,获得的结果与上述结论一致。即掺氢后无定形硅的光学能隙由 1.48 eV 逐渐增加至 1.75 eV 左右。光学能隙的增加必将引起吸收系数的减少。这是因为,这种吸收是价带中的电子吸收光子后跃迁到导带的过程,光学能隙改变,将使跃迁过程的机率发生改变,因而吸收系数也发生变化。

由  $\varepsilon_1 = n^2 - k^2$  及  $\varepsilon_2 = 2nk$ , 可以计算介电常数的实部  $\varepsilon_1$  和虚部  $\varepsilon_2$ 。图 4 表示无定形硅的  $\varepsilon_1$ 、 $\varepsilon_2$  与光子能量的关系。当光子能量由 2 eV 开始逐渐增加时,各个样品的  $\varepsilon_1$  和  $\varepsilon_2$  都逐渐上升,通过峰值后,便逐渐下降。在我们测量的光子能量范围内,  $\varepsilon_1$  和  $\varepsilon_2$  都只有一个峰,曲线变化平滑,这与单晶硅有显著的不同。已经知道,单晶硅的  $\varepsilon_2$  曲线存在三峰结构<sup>[6]</sup>,

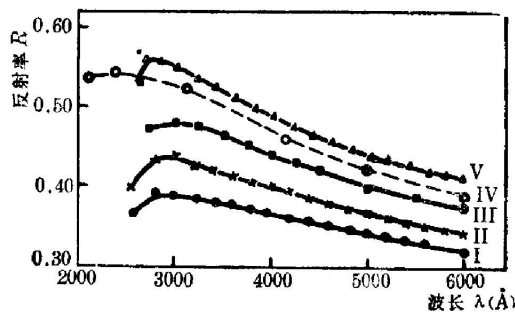


图 5 无定形硅的反射率  $R$  随波长  $\lambda$  的变化

Fig. 5 Variation of the reflectivities  $R$  of various amorphous silicon samples with the wavelengths  $\lambda$

主峰高度也远较无定形硅高。无定形硅掺氢后,  $\varepsilon_1$  及  $\varepsilon_2$  的峰值都明显降低,且随氢分压的增加而单调下降。图中样品 III 及 V,  $\varepsilon_1$  曲线出现负值,这是由于在该波长范围内的  $k$  值大于  $n$  值所致,随着氢含量增加,  $k$  值迅速降低,  $k$  大于  $n$  的现象消失,  $\varepsilon_1$  曲线便不出现负值。可见,掺氢对  $k$  的影响比  $n$  大。图中虚线是 Aspnes 等给出的资料,与我们样品 V 的曲线十分符合。

由某一波长的  $n$ 、 $k$  值,可以计算该波长的反射率  $R$ ,上述某些样品的计算结果表示在图 5 中。当波长从 6000 Å 逐渐减少时,所有样品的反射率都逐渐上升,在 2800 Å 附近达到峰值,然后又下降。图中表明,无定形硅掺氢后,反射率明显降低,整个曲线向下移动。图中虚线表示 Pierce 等<sup>[6]</sup>直接由反射法测得的结果。

值得注意的是,利用椭圆偏振光法能够确定薄膜或固体的反射率,这虽然属于间接测量,但仍能提供较准确的数值。在某些情况下,这种测量是有意义的。

作者感谢高兆兰教授对本工作的支持和关怀。

本工作得到中国科学院科学基金的资助。

### 参 考 文 献

- [1] F. Ohira and Itakura; *Appl. Phys. Lett.*, 1980, **37**, No. 4 (Aug), 398.
- [2] G. E. Jollison et al.; *Phys. Rev. Lett.*, 1981, **46**, No. 21 (May), 1414.
- [3] S. C. Mushakarara and K. Vedam; *Sur. Sci.*, 1980, **96**, No. 1~3 (Jun), 319.
- [4] Q. Kim and Y. S. Park; *Sur. Sci.*, 1980, **96**, No. 1~3 (Jun), 307.
- [5] 莫党、叶贤京;《物理学报》, 1981, **30**, No. 10 (Oct), 1287.
- [6] D. T. Pierce and W. E. Spicer; *Phys. Rev. (B)*, 1972, **5**, No. 8 (Apr), 3017.
- [7] D. E. Aspnes and J. B. Theeten; *Electrochemical Society*, 1980, **127**, No. 6 (Jun), 1359.
- [8] 陈树光、叶贤京、莫党;《半导体学报》, 1982, **3**, No. 1 (Jan), 23.
- [9] 莫党、陈树光、余玉贞、黄炳忠;《物理学报》, 1980, **29**, No. 5 (May), 673.
- [10] P. S. Haugø, F. H. Dill; *IBM J. Res. Develop.*, 1973, **17**, No. 6 (Nov), 472.

- [11] 莫党、朱雅新;《物理》, 1977, **6**, No. 3 (Jun), 140.  
 [12] 莫党、陈树光、林树汉、叶贤京、江任荣;《中山大学学报》(自然科学版), 1982, No. 1 (Feb), 35.  
 [13] B. von Roedern, L. Ley, M. Cardona; *Phys. Rev. Lett.*, 1977, **39**, No. 24 (Dec), 1576.

## Ultraviolet-visible ellipsometric spectra and optical constants of sputtered amorphous silicon

CHEN SHUGUANG JIANG RENRONG AND MO DANG  
 (Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou)

(Received 9 March 1983, revised 16 August 1983)

### Abstract

The optical properties of sputtered amorphous silicon have been measured with an ultraviolet-visible spectroscopic ellipsometer constructed by the authors. The ultraviolet-visible  $n \sim \lambda$  and  $k \sim \lambda$  relations for the amorphous silicon sputtered in various H partial pressures have been obtained and discussed.

(上接第 148 页)

玻璃基本网络的基团也不同,从而进一步探索该种成分玻璃的结构问题。有的论文介绍了用光谱方法研究凝胶法制取的过渡金属离子掺杂的  $\text{SiO}_2$  玻璃的光吸收,从而推断这些离子在玻璃中所处的配位状态及离子价态。总之,用光谱研究玻璃结构的工作,在国内已蓬勃开展起来。预期通过这些途径,今后对玻璃结构的奥秘将会探索得更清楚。

对“含多种玻璃生成体氧化物的物理性质”的研究工作是对“含单一玻璃生成体氧化物的物理性质”研究的发展,工作更加深入,研究更为透彻。华东化工学院和北京建材研究院等单位在通过用离子交换,表面微晶化等途径提高玻璃表面机械强度方面做了一系列的工作,向会议提交的几篇文章,自成一个专题。北京玻璃研究所等单位研究了凝胶转化成玻璃的制备玻璃的新方法,可以在较低的温度(约  $600^\circ\text{C}$  左右)下合成熔化熔点较高的(如含  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ )玻璃,这个课题国外正在蓬勃开展,国内尚属萌芽状态。从熔制工艺角度提供的文章约有 10 余篇,大多是工业部门提出的,如平板玻璃引上工艺的改进等。工艺理论的研究也有质量较高的论文,如“实验室规模玻璃熔炼搅拌的拟研究”、“定量研究消除挥发条纹工艺”及“磷酸盐激光玻璃制造技术”等。

中科院学部委员、光学玻璃专业委员会主任干福熹教授在大会闭幕式上作了总结发言,他首先总结了会议的盛况,指出研究工作的深度、广度都较前次会议有进步。在谈到科技队伍成长时,强调指出有一批年轻人(包括研究生)赶了上来,他们正在接受严格的训练,是开拓新领域的一支重要力量。他指出论文与国际水平相比,还有一定差距,有待于进一步修改。同时指出当前玻璃工艺及应用研究仍是薄弱环节,近两年来,虽然已经取得了可喜的成绩,但在许多方面还要努力。

会议用一天时间,对宣读的论文进行较充分的讨论和评议。会议闭幕以后,1984 年国际玻璃讨论会下属的节目委员会继续对专业委员会推荐的 75 篇论文进行评议,从中选出约 50 篇论文,参加 1984 年在北京召开的国际玻璃讨论会。

中国光学学会光学材料专业委员会也在会议期间召开了工作会议,总结了 83 年工作并制定了 84 年计划。

(张珊珊)