辉光放电无定形硅氢薄膜光隙 计算的一个简化分析法

朱维嘉

(中国科学院上海硅酸盐研究所)

提 要

在计入相干效应和考虑衬底影响的基础上,提出一种非破坏性的简易分析法。利用此法,由非晶硅试样的光谱透射曲线可确定膜层的厚度、折射率及吸收系数。作为例子,我们计算了 a-Si:日 及 a-SiC:H 薄膜的光隙。

一、引言

辉光放电非晶态硅-氢(GD-a-Si:H)薄膜,是一种极有希望的廉价太阳能电池材料。近 年来,它受到人们广泛的重视并得到较深入的研究。随着非晶硅材料科学的进展和电池器 件设计的改进,非晶硅太阳电池的效率获得了稳步的提高^[1]。

光隙,这是非晶硅研究中的一个重要概念。 它既是非晶硅(a-Si)材料光学性能的主要 表征,也是非晶硅电池设计中的一个关键参量。因此,如何准确地测定 a-Si:H 薄膜的光隙, 一直是非晶硅材料领域中受人关注的问题之一。

按照光隙与吸收系数之间的关系[2];



图 1 非晶态半导体中 光吸收谱示意图 Fig. 1 Schematic of the absorption spectrum of amorphous semiconductors

$$(\alpha\hbar\omega)^{1/2} = B(\hbar\omega - E_g^{\mathcal{H}}) \tag{1}$$

可知,为了求得 α-Si 薄膜的光隙 E^{*},必须测定薄膜的光吸收 系数 α(ω)。就光隙计算而言,主要感兴趣的吸收范围是 α> 10⁴ cm⁻¹,亦即在吸收边限以上的高吸收 Δ 区(参见图 1),或 称方次律吸收区。

求算 a-Si 薄膜的吸收系数时,常采用接近正入射的透射 测量,再根据 Connel 等⁽⁸¹导出的公式计算。但这一公式未计 入光线透过薄膜时的相干效应,亦未考虑衬底的影响。本文 从薄膜光学理论出发,在计及衬底吸收的基础上,推演出试样 (包括 a-Si:H 薄膜与玻璃衬底)透射率与薄膜吸收系数之间 的关系。以此为基础,同时给出 a-Si 薄膜的厚度、折射率以 及玻璃衬底吸收等的具体算式,由此进而算得光隙。这样, 只须通过对一块(a-Si:H 薄膜/玻璃)试样光谱透射曲线的解

析,即可得到 a-Si:H 薄膜材料的光吸收系数与光隙。

收稿日期: 1985年3月22日; 收到修改稿日期: 1985年5月20日

二、公式的推演

1. 透射率 T 与吸收系数 a 的关系

12 期

薄膜透射率 T 是入射光子能量(或波长)、膜层及衬底光学性质的复杂函数, 解决这个 问题的基础是 Maxwell 方程。下面, 我们依据薄膜光

学的若干结果,导出薄膜的透射率公式。 所有推导均 假定光在正入射条件下进行。 试样的光学结构如图 2 所示。图中 no----入射及

出射介质之折射率(一般为空气); \tilde{n}_1 ——a-Si 吸收膜 的复折射率, $\tilde{n}_1 = n_1 - ik_1$; n_2 —透明衬底之折射率; d-----透明玻璃衬底之厚度; D----透明玻璃衬底之厚 度。

虑在膜中的多次反射后,其透射合振幅为

由薄膜光学^[4]知,光通过厚为d的a-Si膜,并考

R

图 2 相应于方程(10)的试样光学结构 Fig. 2 Optical configuration corresponding to Equation (10)

$$T_{1} = \frac{\tilde{t}_{1} \cdot \tilde{t}_{2} \exp(-i\delta)}{1 + \tilde{\tau}_{1} \cdot \tilde{\tau}_{2} \exp(-2i\delta)}$$
(2)

式中 r、t 分别为界面的复非涅尔反射、透射系数; 足标 1 表示空气-薄膜界面, 足标 2 表示薄 膜-玻璃界面; 2δ 为透过膜层的相邻二相干光束的复位相差, $2\delta = \frac{4\pi}{\lambda}(n_1 - ik_1)d$, $n_1 \to k_1$ 分 别为膜层的实数折射率及消光系数。薄膜透射率则为:

$$T_{F} = \frac{n_{2}}{n_{0}} T_{1} \cdot T_{1}^{*}$$

$$= \frac{n_{2}}{n_{0}} \cdot \frac{|\tilde{t}_{1}|^{2} \cdot |\tilde{t}_{2}|^{2} \cdot \exp(-\alpha_{1}d)}{1 + (\tilde{t}_{1}^{*}\tilde{t}_{2}^{*}e^{2i\delta}\tilde{\delta} + \tilde{t}_{1}\tilde{t}_{2}e^{-2i\delta}\tilde{\delta}) + |\tilde{t}_{1}|^{2} \cdot |\tilde{t}_{2}|^{2} \cdot \exp(-2\alpha_{1}d)},$$
(3)

式中"*"号表示复数共轭, $\alpha_1 = \frac{4\pi}{\lambda} k_1$ 为膜层的吸收系数。(3)式右端诸项分别计算如下 (参见图 2):

$$\frac{n_2}{n_0} \cdot |\tilde{t}_1|^2 \cdot |\tilde{t}_2|^2 = \frac{16n_0n_2(n_1^2 + k_1^2)}{[(n_0 + n_1)^2 + k_1^2] \cdot [(n_1 + n_2)^2 + k_1^2]},$$
(4)

$$\mathcal{U}\mathcal{B} \qquad \tilde{r}_{1}\tilde{r}_{2}\exp(-2i\delta) = \sqrt{\frac{(n_{0}-n_{1})^{2}+k_{1}^{2}}{(n_{0}+n_{1})^{2}+k_{1}^{2}}} \cdot \sqrt{\frac{(n_{1}-n_{2})^{2}+k_{1}^{2}}{(n_{1}+n_{2})^{2}+k_{1}^{2}}} \\ \cdot \exp(-\alpha_{1}d) \cdot \exp\left[i\left(\arg\tilde{r}_{1}+\arg\tilde{r}_{2}-\frac{4\pi}{\lambda}n_{1}d\right)\right],$$

则(3)式右端圆括弧内之和为:

$$2\sqrt{\frac{(n_{0}-n_{1})^{2}+k_{1}^{2}}{(n_{0}+n_{1})^{2}+k_{1}^{2}}}\cdot\sqrt{\frac{(n_{1}-n_{2})^{2}+k_{1}^{2}}{(n_{1}+n_{2})^{2}+k_{1}^{2}}}$$

$$\cdot\exp(-\alpha_{1}d)\cdot\cos\left(\frac{4\pi n_{1}d}{\lambda}-\arg\tilde{r}_{1}-\arg\tilde{r}_{2}\right)_{o}$$
 (5)

而



学

$$|\tilde{r}_{1}|^{2}|\tilde{r}_{2}|^{2} = \left[\frac{(n_{0}-n_{1})^{2}+k_{1}^{2}}{(n_{0}+n_{1})^{2}+k_{1}^{2}}\right] \cdot \left[\frac{(n_{1}-n_{2})^{2}+k_{1}^{2}}{(n_{1}+n_{2})^{2}+k_{1}^{2}}\right]_{\bullet}$$
(6)

$$T_{F} = \left\{ \frac{16 n_{0} n_{2} (n_{1}^{2} + k_{1}^{2}) \cdot \exp(-\alpha_{1} d)}{\left[(n_{0} + n_{1})^{2} + k_{1}^{2} \right] \cdot \left[(n_{1} + n_{2})^{2} + k_{1}^{2} \right]} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}{(n_{0} + n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \cdot \sqrt{\frac{(n_{1} - n_{2})^{2} + k_{1}^{2}}{(n_{1} + n_{2})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}{(n_{0} + n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \cdot \sqrt{\frac{(n_{1} - n_{2})^{2} + k_{1}^{2}}{(n_{1} + n_{2})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}{(n_{0} + n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \cdot \sqrt{\frac{(n_{1} - n_{2})^{2} + k_{1}^{2}}{(n_{1} + n_{2})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}{(n_{0} + n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \cdot \exp(-\alpha_{1} d) \cdot \cos\left(\frac{4\pi n_{1} d}{\lambda} - \arg \tilde{r}_{1} - \arg \tilde{r}_{2}}{(n_{1} + n_{2})^{2} + k_{1}^{2}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}{(n_{0} + n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \cdot \exp(-\alpha_{1} d) \cdot \cos\left(\frac{4\pi n_{1} d}{\lambda} - \arg \tilde{r}_{1} - \arg \tilde{r}_{2}}{(n_{1} + n_{2})^{2} + k_{1}^{2}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_{1})^{2} + k_{1}^{2}} \right\} / \left\{ 1 + 2 \cdot \sqrt{\frac{(n_{0} - n_$$

但由图 2 可见,实际测得的是整个试样的透射率 T_{M} ,而不是膜层的透射率 T_{P} ,因此,必须考虑衬底光学特性的影响。我们按照文献[5]对此类问题的处理方法,令总透射率为

$$T_{\boldsymbol{\mu}} = T_{\boldsymbol{s}} \cdot T_{\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{o}}} \tag{8}$$

引入 T_s 是为了考虑光束在衬底内的附加损失,其值经计算为(参见图 2): $T_s = (1 - R_3) \exp(-\alpha_2 D) / [1 - R_s R'_1 \exp(-2\alpha_2 D)]$

式中 $\alpha_2 = \frac{4\pi}{\lambda} k_2$ 为衬底的吸收系数;因消光系数与折射率相比均很小,所有 k^2 项均可略去, 上式简化为:

$$T_{s} = \frac{\left[1 - \left(\frac{n_{2} - n_{0}}{n_{2} + n_{0}}\right)^{2}\right] \cdot \exp(-\alpha_{2}D)}{1 - \left(\frac{n_{2} - n_{0}}{n_{2} + n_{0}}\right)^{2} \cdot \left(\frac{n_{2} - n_{1}}{n_{2} + n_{1}}\right)^{2} \cdot \exp(-2\alpha_{2}D)}$$
(9)

于是,我们由(8)式得到膜与衬底组合之透射率:

$$T_{\mathcal{M}} = \left\{ T_{\mathcal{B}} \cdot \frac{16n_0n_2(n_1^2 + k_1^2)\exp(-\alpha_1 d)}{\left[(n_0 + n_1)^2 + k_1^2 \right] \left[(n_1 + n_2)^2 + k_1^2 \right]} \right\} / \\ \left\{ 1 + 2\sqrt{\frac{(n_0 - n_1)^2 + k_1^2}{(n_0 + n_1)^2 + k_1^2}} \cdot \sqrt{\frac{(n_1 - n_2)^2 + k_1^2}{(n_1 + n_2)^2 + k_1^2}} \\ \times \exp(-\alpha_1 d) \cdot \cos\left(\frac{4\pi n_1 d}{\lambda} - \arg \tilde{r}_1 - \arg \tilde{r}_2 \right) \\ + \left[\frac{(n_0 - n_1)^2 + k_1^2}{(n_0 + n_1)^2 + k_1^2} \right] \left[\frac{(n_1 - n_2)^2 + k_1^2}{(n_1 + n_2)^2 + k_1^2} \right] \cdot \exp(-2\alpha_1 d),$$
(10)

式中Ts由(9)式决定。

2. Ts 之估算

若在(7)式中令 ng=ng=空气折射率=1, ng=1.5(玻璃折射率),且不考虑干涉效应(即 略去含有余弦的波动项),并注意到所有 kf 相对于前项皆很小,可略去,则可求得衬底玻璃 透射率为

$$T_{g} = \frac{(16 \times 1.5^{2}/2.5^{4}) \cdot \exp(-\alpha_{\text{E}}d_{\text{B}})}{1 + 0.2^{4} \cdot \exp(-2\alpha_{\text{E}}d_{\text{B}})},$$
(7a)

我们采用的衬底为1mm 厚的 95 料玻璃,实测其可见光平均透射率为 90%, 代入上式求得

$$\exp(-\alpha_{\rm BM}d_{\rm BM}) = 0.98, \tag{7b}$$

若按通常采用的平板玻璃透射率公式[6]

$$T = \left[1 - \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2}\right]^2 \exp(-\alpha_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}})$$

计算,结果是完全一致的。

将(7b)代入(9)式,并令 n₁=3.5, n₂=1.5, n₀=1, 得

 $T_s = 0.95_{\circ}$

为使表达式一般化,将(10)式中 n_1 写成 n, k_1 写成 k, α_1 写成 α ,并令 $n_0=1$ (空气), $n_3=1.5($ 玻璃),再将 $T_s=0.95$ 代入,最后即得总透射率为

$$T_{\mathbf{M}} = \left\{ \frac{22.8 \left(n^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}\right) \cdot \exp(-\alpha d)}{\left[\left(1+n\right)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}\right] \left[\left(1.5+n\right)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}\right] \right\} \right/ \\ \left\{ 1 + 2 \sqrt{\frac{(n-1)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}}{(n+1)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}}} \cdot \sqrt{\frac{(n-1.5)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}}{(n+1.5)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}}} \cdot \exp(-\alpha d) \right. \\ \left. \times \cos\left[\frac{4\pi n d}{\lambda} - tg^{-1} \left(\frac{2\alpha^{2} \lambda^{2} / 16\pi^{2}}{1-n^{2} - \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}} \right) - tg^{-1} \left(\frac{-3\alpha^{2} \lambda^{2} / 16\pi^{2}}{n^{2} - 2.25 + \frac{\alpha^{2} \pi^{2}}{16\pi^{2}}} \right) \right] \right. \\ \left. + \left[\frac{(n-1)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}}{(n+1)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}} \right] \cdot \left[\frac{(n-1.5)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}}{(n+1.5)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}} \right] \cdot \exp(-2\alpha d) \right]_{\circ}$$
(11)

这个式子与国外结果^[3,7]略有不同,见下式:

$$T = \frac{(1-R_1)(1-R_2)(1-R_3)\exp(-\alpha d)}{(1-R_2R_3)\{1-[R_1R_2+R_1R_3(1-R_2)^2]\exp(-2\alpha d)\}}$$
(12)

(12)式与(11)式相比,显然未考虑衬底吸收的影响,系数显得有差异;此外,在式(11)中出现 了含有余弦的波动项。可以认为,该项反映了在近红外低吸收区存在干涉效应。如众所周 知,实测的透射曲线在近红外区确实表现出这种干涉现象,见图 3。因此,(11)式较(12)式 更为合理。

计算光隙时,主要考虑高吸收区,见图 4。这时,干涉效应可忽略,即(11)式分母中余弦 项不予考虑;又,在高吸收区,一般我们有 exp(-2αd)≪1*,则(11)式分母中第三项相对于 "1"可略去,故有:

$$T_{M} = \frac{22.8 \left(n^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}\right) \cdot \exp(-\alpha d)}{\left[\left(1+n\right)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}\right] \cdot \left[\left(1.5+n\right)^{2} + \frac{\alpha^{2} \lambda^{2}}{16\pi^{2}}\right]^{\circ}}$$
(11a)

* a 的数值--般不小于 5×10⁴ cm⁻¹, d 的数量级为 10⁻⁴ cm, 则 exp(-2ad) = exp(-10) ≪1。





图 3 1.1 μm 厚 α-Si:Η 膜(玻璃基底) 的近红外透射率谱

Fig. 3 Transmittance spectrum $(800 \sim 3000 \text{ nm})$ of a 1.1 μ m thich a-Si:H film on glass substrate 图 4 左图中同一试样在波长 510~560 nm 范围内的透射率谱(使用 OD=3 光密度片) Fig. 4 Transmittance spectrum for the sample in Fig. 3 in the wavelength range 510~560 nm (using a filter with OD=3)

若更注意到
$$k^2 = \frac{\alpha^2 \lambda^2}{16\pi^2}$$
与 n^2 等相比很小,则进一步简化为:

$$T_{M} = \frac{22.8n^2 \cdot \exp(-\alpha d)}{(1+n)^2 (1.5+n)^2},$$
(11b)

(11a)与(11b)式,即我们据之以求 a 的式子。一般采用(11b)式即已足够。

3. 薄膜折射率的计算

在近红外区, a-Si:H 薄膜的折射率实际基本不变,我们考虑其色散可略;再者在此区 膜层的吸收很小, exp(-ad)→1;照例可略去 k² 项,则(11)式简化为:

$$T - \frac{\frac{22.0n^{2}}{(1+n)^{2} \cdot (1.5+n)^{2}}}{1+2\left(\frac{n-1}{n+1}\right)\left(\frac{n-1.5}{n+1.5}\right)\cos\left(\frac{4\pi nd}{\lambda} - \arg\tilde{r}_{1} - \arg\tilde{r}_{2}\right) + \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^{2}\left(\frac{n-1.5}{n+1.5}\right)^{2}},$$

显然 T 具有最大值 T_{max} 及最小值 T_{min} ,若用 K 表示两者之比的平方根,则由上式易得

$$K = \left(\frac{T_{\text{max}}}{T_{\text{min}}}\right)^{1/2} = \frac{n^2 + 1.5}{2.5n}$$

或

$$n^{2}-2.5 Kn+1.5=0,$$
(13)
$$(T_{\min})^{1/2}=2\sqrt{1.5n}/(n^{2}+1.5)$$

以及或

$$n^2 - \frac{2.45n}{\sqrt{T_{\min}}} + 1.5 = 0_{\circ}$$
 (14)

由实测的透射率曲线近红外区量得 $T_{\text{max}} \gtrsim T_{\text{min}}$,分别代入(13)或(14)式,可算得薄膜折射 率 n_0 例如,在图 3 中,按 $A_{,B}$ 点算得 n_1 =3.25;按 $O_{,D}$ 点算得 n_2 =3.23,故折射率可取 为 n=3.24。这样算得的 n 自然指的是薄膜在近红外区的折射率。由于我们工作的着眼点 在于使测量简易可行和分析快速,因此,以近红外区的折射率 n 代替可见区的折射率来计算 光隙而不考虑色散。我们对由此引入的误差作个简略分析。由(11b)式易得

$$\Delta \alpha = \frac{2}{d} \left[1 - \frac{n^2 + 2.5n}{(n^2 + 2.5n + 2.5)^2} \right] \frac{\Delta n}{n} \, .$$

计算光隙时, α 的取值应大于 10^4 cm⁻¹, 最好能超过 5×10⁴ cm⁻¹, 厚度 d 的 数量级为 10^{-4} cm, 因此,

$$\left|\frac{\Delta \alpha}{\alpha}\right| \leq \frac{2}{5 \times 10^4 \times 10^{-4}} \left|\frac{\Delta n}{n}\right| = 0.4 \left|\frac{\Delta n}{n}\right|$$

这样,折射率的相对偏差为 20% 时, α 的相对误差不超过 8%, 就光隙计算而言, 此误差仍 是可容许的。当然,随着光子能量的增大,折射率"代用"引起的偏差 $\frac{\Delta n}{n}$ 会增大, 然而幸运 的是,这时 α 也会增大。

4. 薄膜厚度之确定

在由透射率曲线求算 a-Si:H 薄膜厚度时,存在着一个具体困难,即:一般讲,干涉条纹的级次(即下面式 (15)中的 M 值)并不知道。克服此困难的办法是测量两相邻透射极值处的波长,并应用正入射条件,得

$$2nd - M\lambda_1 - (M+1)\lambda_2, \tag{15}$$

M 为某一自然数。而有

$$d = \frac{(\lambda_2^{-1} - \lambda_1^{-1})^{-1}}{2n} = \frac{1}{2n\Delta(\lambda^{-1})},$$
(16)

结合(13)或(14)式,即可算得膜厚 d。例如,仍见图 3。由 A、C 两点算得膜厚为 1.10 μm, 由 B、D 两点算得为 1.18 μm,故膜厚可取为 d=1.14 μm。

至此,我们已完成了求算 α 的准备工作,只须依次将由实验曲线所测得的 T_{μ} 和 λ ,以及计算得到的 n 和 d 一并代入(11a)或(11b)式中,然后解超越代数方程,便可求得 $\alpha(\lambda)$ 值。

三、测试与结果

光隙测试及计算步骤如下。

首先测量试样的光谱透射率 T_{M} ; 由所得透射率曲线的红外区(见图 3)按(13)或(14)式 可算得薄膜的折射率 n, 由(15)式得出薄膜厚度 d, 然后将它们代入(11a)或(11b), 求出膜 层在高吸收区(见图 4)之吸收系数 $\alpha(\lambda)$;最后,根据式(1),作 $\sqrt{a\hbar\omega} \sim \hbar\omega$ 图,应为一直线, 外推直线于 $\alpha = 0$ 处, 横轴截距即为所求光隙 D_{σ}^{*} 。作为例子,我们举出图5中 α -SiC:H 试样(▲者)计算光隙时所须的有关数据如下。

光谱透射率是用 Beckmen 仪器公司制造的 UV 5240 及 UV 5270 型紫外-可见-近红外 分光光度计测量的。由(11)式的推演过程可知,测量时须将膜面正对入射光束,且在参考光 阑内不应放置衬底玻璃伴样;此外,为使可见光区内短波部分的透射率读数精密起见,沿该 区内波长递减的方向,依次使用了进口的 OD=1~3 的光密度片。

所研究的样品系采用射频辉光放电法沉积的 a-Si:H 薄 膜 及 a-SiO:H 薄 膜,衬底为 ¢20 mm、厚 1 mm 的国产 95 料抛光玻璃片,衬底加热温度为 300°C。

Table 1 Experimental data for the d-510; H sample in Fig. 5				
波 长 (Å)	透过率 (%)	吸收系数 α (cm ⁻¹)	光子能量 <i>E</i> (eV)	\sqrt{aE} (eV/cm) ^{1/3}
4795	0.0800	6.1×10^4	2.57	396
4770	0.0595	$6.4 imes 10^4$	2.59	407
4 745	0.0440	6.6×10 ⁴	2,60	414
4720	0.0322	6.9×10^{4}	2.62	425
469 5	0,0232	7.2×10^{4}	2.63	435
4670	0.0165	7.6×10^{4}	2.64	448
4645	0.0117	7.9×10^{4}	2.66	458
4620	0.0082	8.2×10^{4}	2.67	468
4 59 5	0,0055	$8.6 imes 10^{4}$	2.69	.481
4 570	0.0039	8.9×10^{4}	2.70	490
45 45	0.0025	9.3×104	2.72	50 3
4520	0.0017	9.7×104	2.73	515
4495	0.0007	$1.0 imes 10^{5}$	2.75	524
4445	0.0005	1.1×10^{5}	2.78	553

表1 a-SiC:H 试样(图5)的有关数据

该膜层之厚度与折射率业已分别算得为: d=1.1 µm, n=2.8(见图 5)。





energy for a-Si:H and a-SiC:H films

图 5 是有关试样的√<u>α</u>E~E图。其中 "▲"号为 a-SiO:H 试样, "●"号为 a-Si:H 试样,均由本所制备;"▽"号是1988年美国芝 加哥大学物理系 H. Fritzsche 教授来我所进 行访问研究时所带样品,他们测定的数值是 Eg=1.71eV。我所按本文前述方法测定光 隙,所有主要计算均编成计算机程序,对"▽" 号样品结果为 D^{*}=1.73 eV, 与国外数据基 本吻合。

我们制备的 a-Si: 日及 a-SiO: 日样品, 经由上法测定,光隙分别为1.75 eV及2.05 eV。由图显见,加入碳原子后使膜的光隙变 大,成为宽带隙窗口材料。这原因很可能是 由于碳的电负性 (2.5) 比氢(2.1)及硅(1.8) 为大,因此,它的加入使得最紧邻原子 i, i 的配偶轨道 j 之间的互作用矩阵元 [8]

 $V_2 = \langle i, j | H | i', j \rangle,$

发生改变,增强了键能,导致了能隙展宽。

参加本工作的还有陈惠明、施雪君。美

国芝加哥大学 H. Fritzshe 教授审阅了本文原稿并提出宝贵意见,本所程如光副研究员对

1 k.*

本工作给予关心,作者表示衷心感谢。我所苗华兰、章敏权等同志提供有关样品,沈定坤、陈 幼新进行了光谱透射率的测量,在此一并表示谢意。

s (1**1**1) 考文献

[1] Yoshihiro Hamakawa; Solar Energy Mater, 1982, 8, No. 1~3 (Nov), 101.

[2] E. A. Davis, N. F. Mott; Phil. Mag., 1970, 22, No. 179 (Nov), 903.

[3] G. A. N. Connell et al.; Advances in Physics, 1973, 22, No. 5 (Sep), 643.

[4] O.S. Heavans; «Optical Properties of Thin Solids Films», (Butterworths, London, 1955).

[5] Hans W. Verleur; J. O. S. A., 1968, 58, No. 10 (Oct), 1356.

[6] 西北轻工业学院主编;《玻璃工艺学》,(轻工业出版社,北京, 1982),149。.

[7] S. Nitta et al.; Solar Energy Mater., 1982, 8, No. 1~3 (Nov), 249.

[8] Zhu Weijia; J. Non-Crysta. Solids, 1984, 65, No. 1 (Jun), 183.

A simple analytical method for determining the optical gap of amorphous silicon films

ZHU WEIJIA

(Shanghai Institute of Ceramics, Academia Sinica)

(Received 22 March 1985; revised 30 April 1985)

Abstract

For material research and device design of amorphous silicon solar cells, it is required to determine the refractive indices, thickness and absorption coefficients of a-Si films. Taking interferences and substracte effects into account, we propose a simple analytical method that allows us to determine the thickness, refractive index and absorption coefficient of a film from the usual transmittance spectrum at normal incidence. As an example, we calculated the optical gap of a-Si:H and a-SiC:H films.