

文章编号:1004-4213(2011)07-1096-5

基于反射和透射光谱的氢化非晶硅薄膜厚度 及光学常量计算

丁文革,苑静,李文博,李彬,于威,傅广生

(河北大学 物理科学与技术学院 河北省光电信息材料重点实验室,河北 保定 071002)

摘 要:采用紫外-可见透射光谱仪测量了对靶磁控溅射沉积法制备的氢化非晶硅(a-Si:H)薄膜的透射光谱和反射光谱.利用 $T/(1-R)$ 方法来确定薄膜的吸收系数,进而得到薄膜的消光系数;通过拟合薄膜透射光谱干涉极大值和极小值的包络线来确定薄膜折射率和厚度的初始值,并利用干涉极值公式进一步优化薄膜的厚度值和折射率;利用柯西公式对得到的薄膜折射率进行拟合,给出了 a-Si:H 薄膜的色散关系曲线.为了验证该方法确定的薄膜厚度和光学常量的可靠性,将理论计算得到的透射光谱与实验数据进行了比较,结果显示两条曲线基本重合,可见这是确定 a-Si:H 薄膜厚度及光学常量的一种有效方法.

关键词:氢化非晶硅;透射谱;薄膜厚度;光学常量

中图分类号:O484.5

文献标识码:A

doi:10.3788/gzxb20114007.1096

0 引言

随着光电器件的逐渐发展,a-Si:H 薄膜以其光吸收率高、禁带宽度可控、高电阻温度系数、低的热导率、可大面积低温沉积薄膜、薄膜沉积衬底种类不限、生产工艺简单、与硅半导体工艺兼容等诸多突出优点而备受关注,在太阳能电池、薄膜场效应管、液晶显示、红外成像等领域得到快速应用^[1-6].而薄膜的厚度和光学常量在很大程度上决定了薄膜的力学、光学和电学性能.厚度和光学常量的微小变化,可能对整个器件的性能产生很大影响,准确地确定光学薄膜厚度和光学常量在薄膜实用化方面具有重要意义.目前,有多种测量方法,如椭偏法、台阶测厚法、棱镜耦合法等用于确定薄膜厚度及光学常量,但 these 方法具有测量过程复杂,准确度较低,测量过程中薄膜容易受损等缺点.相比之下反射和透射光谱测量法简单方便,测量数值稳定、准确、非破坏性,是一种更加实用的测量方法.

本文基于薄膜的反射和透射光谱,根据薄膜干涉效应,来确定薄膜的吸收系数、消光系数、折射率和薄膜厚度等参量.利用这些参量计算得出的薄膜透射谱,与实验数据进行对比,验证了该方法的准确

性.同时该方法的计算过程不基于最小值优化算法,无需复杂软件辅助,计算简单、速度快,是确定 a-Si:H 薄膜厚度及光学常量的一种有效方法.

1 氢化非晶硅薄膜制备及测试

本工作利用对靶磁控反应溅射技术制备了 a-Si:H 薄膜.溅射采用 2 inch 的对靶设备,纯度 99.999% 的 Si 作为靶材,样品位于溅射靶底 2 cm 位置,以石英作为衬底,背景真空度为 6×10^{-4} Pa.每次溅射前在 Ar 环境中放电半小时,以除去 Si 靶表面的氧化层及其他杂质.采用 H₂ 作为反应气体源,沉积气压控制在 0.6 Pa,Ar 和 H₂ 流量分别为 15 sccm 和 20 sccm,溅射功率 23 W,沉积时间 3 h.采用 ZolixSBP300 型紫外-可见透射光谱仪测量所制备样品在 500~1 100 nm 范围的透射光谱和反射光谱.

图 1 中给出了光正入射薄膜系统的示意图,薄膜系统置于空气中,空气折射率 $n_0 = 1.0$,薄膜复折射率 $\tilde{n} = n + i\kappa$,其中 n 为折射率, κ 为消光系数.薄膜厚度为 d ,选用石英作为衬底,折射率为 s .正入射时薄膜透射光谱和准正入射时薄膜反射光谱的测量结果示于图 2,由图可见波长小于 500 nm 范围为强

基金项目:国家自然科学基金(No.60940020)资助

第一作者:丁文革(1966),女,教授,博士,主要研究方向为光与物质相互作用.Email:dwg@hbu.cn

收稿日期:2011-01-25;修回日期:2011-04-01

吸收区域,波长大于 570 nm 的反射和透射光谱曲线上具有周期性变化的干涉峰,这是入射光在薄膜层的多光束干涉造成.若薄膜厚度不均匀,则经过不同薄膜厚度的光反射或透射后,干涉峰相互叠加,其光谱中不出现干涉峰或干涉峰不明显.图 2 中明显的干涉峰和较大的调制深度表明,实验中制备的 a-Si:H 薄膜厚度比较均匀^[7].

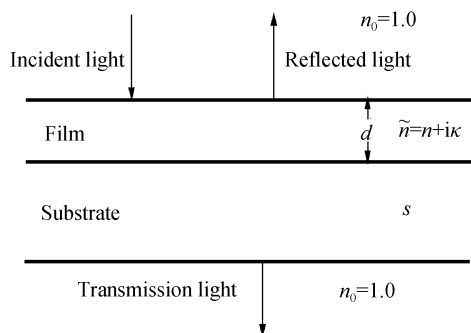


图 1 薄膜系统的反射与透射

Fig. 1 Transmission and reflectance of the film system

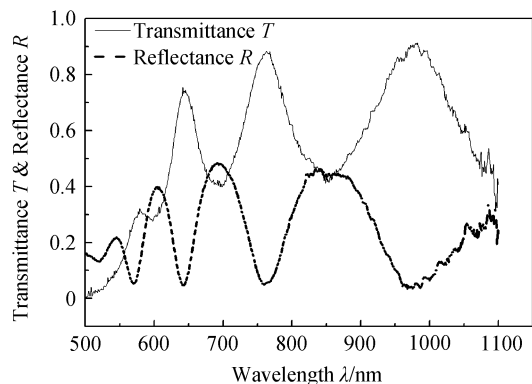


图 2 a-Si:H 薄膜的透射光谱和反射光谱

Fig. 2 Transmission and reflectance spectra of the a-Si:H film

2 理论计算

2.1 a-Si:H 薄膜吸收系数和消光系数

由于薄膜干涉效应,其透射光谱 T 和反射光谱 R 均存在干涉峰,直接由透射光谱计算得到的吸收光谱在带隙吸收区和指数吸收区表现出很强的干涉峰,从而对薄膜光学常量的准确计算造成干扰.而 $T/(1-R)$ 曲线呈单调增加趋势,因此利用该单调性计算薄膜的吸收系数 α ,即

$$\alpha = -\frac{1}{d} \ln\left(\frac{T}{1-R}\right) \quad (1)$$

再利用吸收系数与消光系数关系 $\alpha = 4\pi\kappa/\lambda$, 给出薄膜的消光系数 κ . 图 3 中给出了 a-Si:H 薄膜的 $(\alpha E)^{1/2}$ 与 E 的关系曲线及消光系数谱线,其中 E 为入射光子的能量.从图中可以看出,薄膜带隙为 1.77 eV,这是典型的 a-Si:H 薄膜特征.

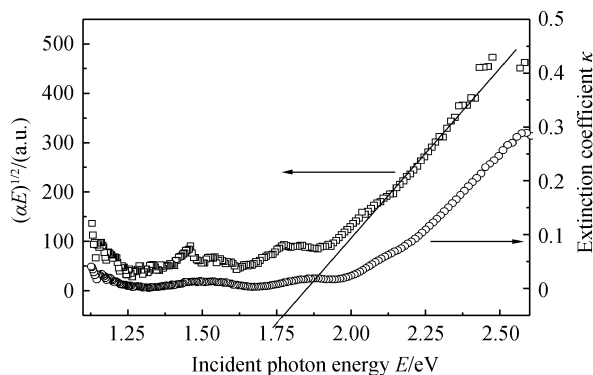


图 3 a-Si:H 薄膜的 $(\alpha E)^{1/2}$ 与 E 的关系曲线及消光系数谱线

Fig. 3 The dependence of $(\alpha E)^{1/2}$ and extinction coefficient on photon energy E for spectra for a-Si:H thin film

2.2 折射率及薄膜厚度计算

采用 Origin 绘图软件,绘出图 2 透射光谱中的干涉极大点和极小点的包络线,并对其进行多项式拟和得到 $T_M(\lambda)$ 和 $T_m(\lambda)$,如图 4, $T_M(\lambda)$ 为上包络线, $T_m(\lambda)$ 为下包络线^[8]. 由于材料的色散效应, a-Si:H 薄膜的折射率是随光波长变化的.为更加准确地利用透射谱的干涉效应来确定薄膜的厚度,需要在计算过程中考虑折射率随波长变化的影响^[9].

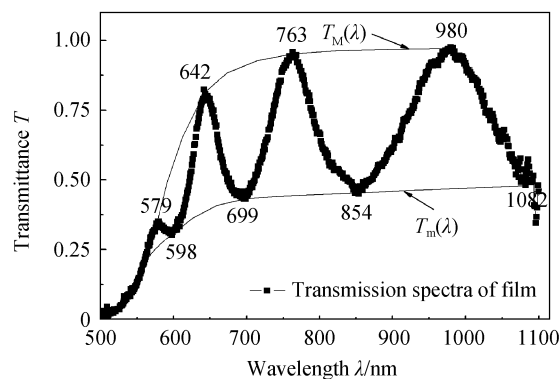


图 4 a-Si:H 薄膜的透射光谱, $T_M(\lambda)$ 和 $T_m(\lambda)$ 分别为透射极大值和极小值的包络线

Fig. 4 Transmission spectra of a-Si:H film, $T_M(\lambda)$ and $T_m(\lambda)$ is the envelopes of interference maxima and minima

首先根据实验测得的石英衬底透射率 $T_s(\lambda)$ 来确定衬底折射率.由于石英衬底厚度比沉积的薄膜大几个量级,不考虑光在衬底层的干涉,并忽略衬底的吸收.这时衬底折射率 s 满足

$$s = 1/T_s + (1/T_s - 1)^{1/2} \quad (2)$$

再利用透射光谱包络线 $T_M(\lambda)$ 和 $T_m(\lambda)$ 给出薄膜的折射率 n_1 ^[8]

$$n_1 = [N_1 + (N_1^2 - s^2)^{1/2}]^{1/2} \quad (3)$$

式中, $N_1 = 2s(T_M - T_m)/T_M T_m + (s^2 + 1)/2$. 取透射光谱干涉峰中两相邻透射最大值(或最小值)所对

应的入射光波长 λ_1 和 λ_2 , $n_1(\lambda_1)$ 和 $n_1(\lambda_2)$ 是入射光波长 λ_1 和 λ_2 所对应的折射指数, 则由干涉极值条件得出薄膜厚度为

$$d_1(\lambda) = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2[\lambda_1 n_1(\lambda_2) - \lambda_2 n_1(\lambda_1)]} \quad (4)$$

表 1 a-Si:H 薄膜各参量的计算结果

Table 1 The calculated values based on transmission spectra of the a-Si:H film

Wavelength/nm	T_M	T_m	s	n_1	d_1	m_0	m	d_2	n_2
579	0.362 04	0.257 62	1.395 949	---	---	---	--	---	---
598	0.542 71	0.304 02	1.399 419	3.297 909	---	5.753 072	5.5	498.649 3	3.308 021
642	0.812 01	0.383 8	1.394 623	3.228 512	436.939 2	5.246 016	5	497.133 1	3.228 564
699	0.911 59	0.432 55	1.369 977	3.055 031	474.887 9	4.559 327	4.5	514.806 5	3.163 691
763	0.951 83	0.446 96	1.373 729	3.033 653	580.968 9	4.147 665	4	503.023 9	3.069 65
854	0.965 25	0.457 13	1.370 908	2.997 491	498.344 1	3.661 528	3.5	498.583 7	3.006 286
980	0.972 01	0.467 46	1.332 752	2.913 179	616.828 2	3.101 012	3	504.603 4	2.957 003
1 082	0.976 82	0.472 82	1.354 278	2.920 69	---	2.815 922	2.5	463.075 4	2.720 644
$\bar{d}_1 = 521.6 \text{ nm}, \sigma_1 = 75.0 \text{ nm}; \bar{d}_2 = 497.1 \text{ nm}; \sigma_2 = 16.2 \text{ nm}$									

从式(4)确定的薄膜厚度易受拟合得到的 $T_M(\lambda)$ 、 $T_m(\lambda)$ 和计算得到的折射率误差的影响, 因此与实际值会有一定偏差, 为了进一步精确确定薄膜厚度, 将计算出的 $n_1(\lambda)$ 和 \bar{d}_1 代入干涉极值公式

$$2n_1 \bar{d}_1 = m_0 \lambda \quad (5)$$

由此得出干涉级数 m_0 . 进一步, 由于波峰干涉级数应为整数, 而波谷干涉级数应为半整数, 并且相邻波峰或波谷的干涉级数应相差 1. 因此当计算得到的干涉级数不符合上述要求时, 需要对相邻的干涉级数加以调整, 偏差较大的数值予以去除, 调整后的干涉级数 m_0 见表 1 中 m 列. 这时再将 $n_1(\lambda)$ 和 m 代入干涉极值公式

$$2n_1 d_2 = m \lambda \quad (6)$$

重新计算得到的薄膜厚度 d_2 , 以及计算出的薄膜厚度平均值 \bar{d}_2 和平均方差 σ_2 , 也列于表 1. σ_2 相对 σ_1 显著降低, 这表明经过优化后的薄膜厚度值 \bar{d}_2 更为准确.

将优化后的薄膜厚度 \bar{d}_2 和干涉级数 m 代入干涉极值公式

$$2n_2 \bar{d}_2 = m \lambda \quad (7)$$

给出薄膜在相应波长下的折射率 n_2 (也列于表 1 中), 此薄膜折射率更加精确. 利用柯西公式

$$n(\lambda) = a + b/\lambda^2 \quad (8)$$

对 n_2 进行拟合, 拟合参量 $a = 2.72, b = 2.12 \times 10^5$, 得出的 a-Si:H 薄膜的色散曲线如图 5. 由图可见随着入射光波长的减小, a-Si:H 薄膜折射指数从近红外光区 2.9(1 082 nm) 逐渐增大到可见光区的 3.3(598 nm). 由此得出的薄膜色散曲线 $n_2(\lambda)$ 数据可以用于精确计算薄膜透射率^[10]. 另外, 图中最后一个数据点(1 082 nm 处)与拟合曲线具有较大的

偏差, 这是由于在绘制透射谱峰的包络线时, 1 082 nm 附近取点存在较大误差所致.

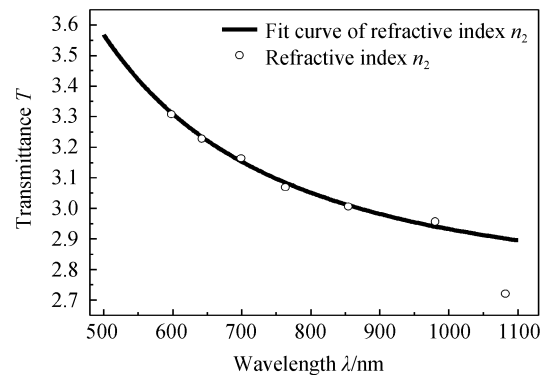


图 5 a-Si:H 薄膜的色散曲线

Fig. 5 Refractive index dispersion spectra for the a-Si:H thin film

由式(4)可见, 薄膜厚度的准确性主要取决于材料色散关系的准确性, 这里折射率数值与透射谱包络线的选取密切相关, 包络线的不合理拟合会导致薄膜厚度计算的误差. 再加上测量仪器的误差, 因此采用不同波峰、波谷组合计算得到的薄膜厚度之间总会存在一定的偏差. 通过多点测量然后求平均值的方法, 可以大大减小上述因素引入的误差. 当 a-Si:H 薄膜厚度在几百纳米~微米范围内时, 由透射谱干涉效应确定的 a-Si:H 薄膜厚度较为准确.

2.3 透射谱计算及实验验证

光线正入射图 1 所示薄膜系统时, 考虑光在系统三个界面上的多次反射和透射, 当薄膜消光系数远小于其折射率 ($\kappa \ll n$) 时, 系统的透射率为^[11]

$$T(\lambda, s, n, d, \kappa) = \frac{Ax_a}{B - Cx_a \cos \varphi + Dx_a^2} \quad (9)$$

式中, $A = 16n^2 s, B = (n+1)^3(n+s^2), C = 2(n^2-1)(n^2-s^2), D = (n-1)^3(n-s^2), \varphi = 4\pi nd/\lambda, x_a =$

$e^{-\alpha d}$. 为检验本理论计算光学常量的准确性,将前面计算得到的 a-Si:H 薄膜光学常量和薄膜厚度 \bar{d}_2 代入式(9),计算得到 a-Si:H 薄膜系统透射曲线,并与实验测量数据进行对比,结果示于图 6. 由图可见在紫外、可见和近红外区计算结果与测量数据基本符合,在 579 nm 附近存在较大偏差,但在各参量计算过程中已去除了此点的影响.

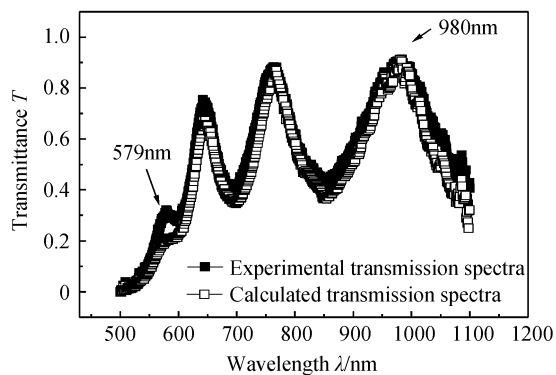


图 6 a-Si:H 薄膜透射光谱的实验测量数据与理论计算结果比较

Fig. 6 The comparison of experimental and calculated transmission spectra of a-Si:H thin film

3 结论

通过对 a-Si:H 薄膜透射光谱分析表明,所制备的 a-Si:H 薄膜厚度均匀. 利用 $T/(1-R)$ 方法确定薄膜的吸收系数,进而得到薄膜的消光系数. 薄膜的 $(\alpha E)^{1/2}$ 与 E 的关系曲线表明所制备薄膜具有典型的非晶硅薄膜特征. 通过拟合薄膜透射光谱干涉极大值和极小值的包络线来确定薄膜折射率和厚度的初始值,再利用干涉极值公式进一步对其优化;利用柯西公式对得到的薄膜折射率进行拟合,给出了 a-Si:H 薄膜的色散关系曲线. 为了验证该方法确定的薄膜厚度和光学常量的可靠性,本文将其代入薄膜系统透射光谱计算公式,并与实验数据进行比较,结果显示两条曲线基本重合,可见这是确定 a-Si:H 薄膜厚度及光学常量的一种快速准确方法,在薄膜材料领域具有实际的应用价值.

参考文献

- [1] CAI Hong-kun, TAO Ke, WANG Lin-shen, *et al.* Interface treatment of amorphous silicon thin film solar cells on flexible substrate[J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, **58**(11): 7921-7925.
- [2] QIAN Xiang-zhong. Study of high image quality amorphous-silicon thin film transistor liquid crystal displays [D]. Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China, 2003.
钱祥忠,高像质非晶硅薄膜晶体管液晶显示器的研究[D]. 成都:电子科技大学,2003.
- [3] LI Shi-bin, WU Zhi-ming, YUAN Kai, *et al.* Study on thermal conductivity of hydrogenated amorphous silicon films [J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, **57**(05): 3126-3131.
李世彬,吴志明,袁凯,等. 氢化非晶硅薄膜的热导率研究[J]. 物理学报, 2008, **57**(05):3126-3131.
- [4] MORENO M, KOSAREV A, TORRES A, *et al.* Fabrication and performance comparison of planar and sandwich structures of micro-bolometers with Ge thermo-sensing layer[J]. *Thin Solid Films*, 2007, **515**(19): 7607- 7610.
- [5] TISSOT J L, 160×120 uncooled amorphous silicon TEC-less detector with 25μm pixel-pitch [J]. *Journal of Applied Optics*, 2007, **28**(1): 1-6.
- [6] MA Tie-ying. Study on the material, design, fabrication and measurement of an amorphous silicon microbolometer [D]. Shanghai: Shanghai Institute of Microsystem and Technology, Chinese Academy of Sciences, 2007.
马铁英. 非晶硅微测辐射热计的材料、设计、制备和测试研究 [D]. 上海:中国科学院上海微系统与信息技术研究所,2007.
- [7] AFIFUDDIN, BUTCHER K S A, TIMMERS H, *et al.* Optical and structural analysis of GaN grown by remote plasma enhanced laser induced chemical vapour deposition [J]. *Physica Status Solidi C*, 2002(1): 499-503.
- [8] MEENAKSHI K. Error minimization in the envelope method for the determination of optical constants of a thin film [J]. *Surface and Interface*, 2010, **42**(3): 145-150.
- [9] ZHANG Jin-cheng, HAO Yue, LI Pei-xian, *et al.* Thickness measurement of GaN film based on transmission spectra[J]. *Acta Physica Sinica*, 2004, **53**(4): 1243-12461.
张进城,郝跃,李培咸,等. 基于透射谱的 GaN 薄膜厚度测量 [J]. 物理学报,2004, **53**(4):1243-12461.
- [10] CARICATO A P, FAZZI A, LEGGIERI G. A computer program for determination of thin films thickness and optical constants[J]. *Applied Surface Science*, 2005, **248**(1-4): 440-445.
- [11] SHAABAN E R. Calculation of the optical constants of amorphous semiconducting As₄₀s₆₀, As₄₀s₃₅se₂₅ and As₄₀se₆₀ thin film from transmittance and reflectance measurements[J]. *Journal of Applied Sciences*, 2006, **6**(2): 340-346.

Thickness and Optical Constants Calculation of Hydrogenated Amorphous Silicon Film Based on Transmission and Reflectance Spectra

DING Wen-ge, YUAN Jing, LI Wen-bo, LI Bin, YU Wei, FU Guang-sheng

(Hebei Key Laboratory of Optic-electronic Information Materials, College of Physics Science and Technology, Hebei University, Baoding, Hebei 071002, China)

Abstract: Hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) films were deposited on quartz substrates by reactive facing target sputtering technique. The transmission and reflectance spectra of a-Si:H thin films measured by UV-VIS transmittance measurement were studied. The absorption coefficient α , therefore extinction coefficient κ , were determined by $T/(1-R)$ method. The refractive index n and film average thickness \bar{d} were determined from the upper and lower envelopes of the transmission spectra, and further modified by the basic equation for interference fringes. The dispersion curve of a-Si:H film fitted by Cauchy dispersion relationship of refractive index was given. In order to illuminate the reliability of the determined parameters, the calculated transmission curve was compared to experimental one, the results show the two curves almost match together. Therefore the method is effective to determine a-Si:H thin film thickness and optical constants.

Key words: Hydrogenated amorphous silicon; Transmission spectra; Film thickness; Optical constants