

# 椭偏透射法测量氢化非晶硅薄膜厚度和光学参数

廖乃镒<sup>1)†</sup> 李 伟<sup>1)</sup> 蒋亚东<sup>1)</sup> 匡跃军<sup>2)</sup> 祁康成<sup>2)</sup> 李世彬<sup>2)</sup> 吴志明<sup>1)</sup>

1) 电子科技大学 电子薄膜与集成器件国家重点实验室 成都 610054)

2) 电子科技大学 光电信息学院 成都 610054)

(2007 年 5 月 13 日收到, 2007 年 6 月 14 日收到修改稿)

针对多角度椭偏测量透明基片上薄膜厚度和光学参数时基片背面非相干反射光的影响问题, 报道了利用椭偏透射谱测量等离子增强化学气相沉积法(PECVD)制备的 a-Si:H 薄膜厚度和光学参数的方法, 分析了基片温度  $T_s$  和辉光放电前气体温度  $T_g$  的影响. 研究表明, 用椭偏透射法测量的 a-Si:H 薄膜厚度值与扫描电镜(SEM)测得的值相当, 推导得到的光学参数与其他研究者得到的结果一致. 该方法可用于生长在透明基片上的其他非晶或多晶薄膜.

关键词: 椭偏测量, 透射法, 光学参数, 氢化非晶硅薄膜

PACC: 0760F, 4225B, 7820D, 6140

## 1. 引 言

氢化非晶硅(a-Si:H)薄膜具有光吸收率较高、电阻温度系数(TCR)相对较大<sup>[1]</sup>、禁带宽度可控、基片种类不限、与硅半导体工艺兼容等突出优点, 在图像传感器、太阳能电池、薄膜晶体管等领域具有广泛的应用. 在大多数电子器件的应用中, 薄膜的厚度和光学参数起着重要的作用. 椭偏测量具有非破坏性、精确、简便易行等优点, 是薄膜厚度和光学参数测量最合适的方法之一<sup>[2]</sup>.

a-Si:H 薄膜的厚度和光学参数测量可以采用反射和透射两种方法. 反射法测量时, 偏振光倾斜(或垂直)入射到薄膜表面并与材料相互作用, 根据反射光强度和相位的变化, 求得薄膜的光学参数<sup>[3,4]</sup>. 这种方法非常精确, 但对于生长在透明基片上的 a-Si:H 薄膜不总是适用的, 因为透明基片背面非相干反射光会影响到测量结果的准确性. 对于生长在单晶硅上的 a-Si:H 薄膜, 由于基片与薄膜的光学参数比较接近, 也不利于椭偏法测量. 用透射法测量 a-Si:H 薄膜的厚度和光学参数时, 涉及基片的光学参数等因素, 所以发展较慢, 应用也较少. 透射法经 Swanepoel<sup>[3]</sup>和 McClain<sup>[5]</sup>改进后, 可用于任何沉积在

透明基片上且在紫外—可见—近红外范围内产生吸收和干涉的薄膜. 本文采用椭偏透射法测量玻璃基片上 a-Si:H 薄膜的厚度和光学参数.

## 2. 试验与方法

采用 PECVD(射频频率 13.56 MHz)工艺在抛光 K9 玻璃基片上沉积不同厚度的 a-Si:H 薄膜, 基片温度  $T_s$  为 80°C—250°C, 辉光放电前气体温度  $T_g$  为室温(RT)—160°C, 反应室气体压力为 60 Pa, 功率密度为 100 mW/cm<sup>2</sup>. 反应气体为(SiH<sub>4</sub> + 1% PH<sub>3</sub>)混合气体, 流速 20 sccm, 沉积时间 10 min. 在辉光放电前, 利用钨灯将气体加热到指定温度.

用德国 SENTECH 公司 SE850 型光谱式椭偏仪进行 a-Si:H 薄膜的透射法测试, 波长 500—2200 nm, 步长 1 nm, 从椭偏透射谱推导得到薄膜的光学参数. 用 JSM-5900LV 型扫描电镜观察 a-Si:H 薄膜的横截面, 验证透射法测得的薄膜厚度.

## 3. 模型与原理

采用反射和透射相结合的方法确定透明基片上 a-Si:H 薄膜的厚度和光学参数已有相关报道<sup>[6,7]</sup>, 但

† E-mail: liaonaiman@sohu.com

仅采用透射法确定薄膜的厚度和光学参数的报道较少.透射法模型假定:1)当光穿过 a-Si:H 薄膜和透明基片时,在三个界面(空气/a-Si:H, a-Si:H/玻璃, 玻璃/空气)上发生多次反射;2)无限厚基片透明且光滑,基片上下表面不平行,因此破坏了玻璃内的干涉效应.

当光透过 a-Si:H 薄膜和透明基片时,透过率可以表达为<sup>[3]</sup>

$$T = \frac{Ax}{B + Cx \cos \delta + Dx^2}, \quad (1)$$

其中  $A = 16n_f^2 n_s$ ,  $B = (n_f + 1)^2(n_f + n_s^2)$ ,  $C = 2(1 - n_f^2)(n_f^2 - n_s^2)$ ,  $D = (n_f - 1)^2(n_f - n_s^2)$ ,  $\delta = 4\pi n_f d/\lambda$ ,  $x = \exp(-\alpha_f d)$ ,  $\alpha_f = 4\pi k_f d/\lambda$ .  $n_f$ ,  $k_f$ ,  $n_s$  分别为薄膜的折射率、消光系数和基片的折射率,  $d$  为薄膜厚度,  $\lambda$  为入射光波长,  $\alpha_f$  为薄膜的吸收系数.

当  $\cos \delta = \pm 1$  时,

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

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

由(1)~(3)式,可得

$$n_f = [N + (N^2 - n_s^2)^{1/2}]^{1/2}, \quad (4)$$

其中  $N = 2n_s \left[ \frac{T_{\max} - T_{\min}}{T_{\max} T_{\min}} \right] + \frac{n_s^2 + 1}{2}$ .

a-Si:H 薄膜的厚度可由干涉方程得到

$$2n_f d = m \cdot \lambda, \quad (5)$$

其中  $m$  是干涉级数.

如果 a-Si:H 薄膜厚度  $d$  知道,则由(1)~(3)式可以得到  $x$  的值:

$$x = \left( \frac{A/T - C \cos \delta}{2D} \right) \mp \left[ \left( \frac{A/T - C \cos \delta}{2D} \right)^2 - \frac{B}{D} \right]^{1/2}, \quad (6)$$

并由此可求得  $\alpha_f$  和  $k_f$  的值.

事实上,制备的 a-Si:H 薄膜在厚度上是不均匀的.如果不考虑 a-Si:H 薄膜的不均匀性,计算得到的光学参数将产生偏差.经过 Richards 等<sup>[8]</sup>改进后,透射法可用于不均匀 a-Si 薄膜(未氢化)且薄膜和基片都对入射光产生吸收的光学参数的测量.这里,我们将这一方法应用到氢化非晶硅(a-Si:H)薄膜.

改进后的模型假定:薄膜的厚度表达为

$$d = \bar{d} + \Delta d, \quad (7)$$

$\bar{d}$  是平均厚度,  $\Delta d$  表示偏离平均厚度的值(如图 1 所示).此时,光经过非均匀薄膜的透过率应在厚度

$d_{\max}$  到  $d_{\min}$  范围内求积分,

$$T_{\Delta d} = \frac{1}{d_{\max} - d_{\min}} \times \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} \frac{A \cdot e^{-\alpha_f d'}}{B + C \cdot e^{-\alpha_f d'} \cos(4\pi n_f d'/\lambda) + D \cdot e^{-2\alpha_f d'}} \times dd', \quad (8)$$

所以椭圆透射法同样可以测量 a-Si:H 薄膜表面的粗糙程度.

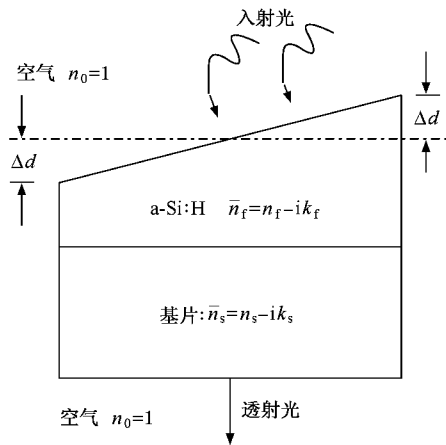


图 1 a-Si:H 薄膜透射谱测量的光学示意图

## 4. 结果与讨论

对于给定的一组用椭圆仪测得的 a-Si:H 薄膜透射谱数据  $\{\lambda_i, T^{\text{meas}}(\lambda_i)\}$  ( $500 \text{ nm} \leq \dots \leq \lambda_{i-1} \leq \lambda_i \leq \lambda_{i+1} \leq \dots \leq 2200 \text{ nm}$ ,  $i = 0, 1, 2, 3, \dots, N$ ) 我们需要估计薄膜的厚度  $d$  和光学参数  $n_f(\lambda_i)$  及  $k_f(\lambda_i)$ , 然后进行数据拟合.对于已知的厚度  $d$  及  $\lambda$ , 必须满足

$$T^{\text{meas}}(\lambda_i) = T^{\text{theor}}[\lambda_i, n_s(\lambda_i), d, n_f(\lambda_i), k_f(\lambda_i)], \quad (9)$$

这里  $T^{\text{theor}}$  是计算得到的 a-Si:H 薄膜和玻璃基片的总透过率,  $n_s(\lambda)$  是玻璃基片的折射率.

寻找最准确厚度的方法是将  $T^{\text{meas}}$  和  $T^{\text{theor}}$  分成  $N$  ( $N = (\lambda_{\max} - \lambda_{\min})/\Delta\lambda$ ) 等分, 然后使实测的透射谱与理论计算的透射谱之间差的平方和最小, 即

$$\min \sum_i [T^{\text{meas}}(\lambda_i) - T^{\text{theor}}(\lambda_i, n_s(\lambda_i), d, n_f(\lambda_i), k_f(\lambda_i))]^2 \quad (10)$$

PECVD 工艺中,基片温度( $T_s$ )和通入反应室内气体的温度( $T_g$ )对 a-Si:H 薄膜的生长速率、微观结构和光电性能将产生重要影响.为了考察这两个因素对 a-Si:H 薄膜生长速率和光学参数的影响,我们

进行了两组不同工艺试验.由于透射法不适合用于测量厚度  $t < 75 \text{ nm}$  的薄膜<sup>9]</sup> 本文制备的 a-Si:H 薄膜厚度都大于这个极限值.图 2 给出了室温条件下测量得到的不同  $T_s$  和  $T_g$  下 a-Si:H 薄膜的椭圆透射谱  $T^{meas}(\lambda)$  及根据模型计算得到的透射谱.容易看出,实测的椭圆透射谱与理论计算的透射谱符合较好,在低吸收区( $\lambda > 800 \text{ nm}$ ) a-Si:H 薄膜显示出了合理的干涉曲线.从透射谱计算的 a-Si:H 薄膜厚度如表 1 所示.薄膜厚度测量还可以采用其他一些

方法,如台阶仪和扫描电镜(SEM)等.本文用 SEM 测量了  $T_s = 250^\circ\text{C}$ ,  $T_g = 80^\circ\text{C}$  条件下制备的 a-Si:H 薄膜厚度(图 3).从表 1 和图 3 可以看出,透射法测量得到的薄膜厚度和 SEM 法测得的值相当,但也存在一定的误差.产生的原因可能有两个:1)透射法本身的精度和准确程度难以拟合得到一个理想的厚度值;2)a-Si:H 薄膜厚度不均匀,透射法与 SEM 法测量的不是同一个区域;3)SEM 法测量 a-Si:H 薄膜厚度本身也存在一定的误差.

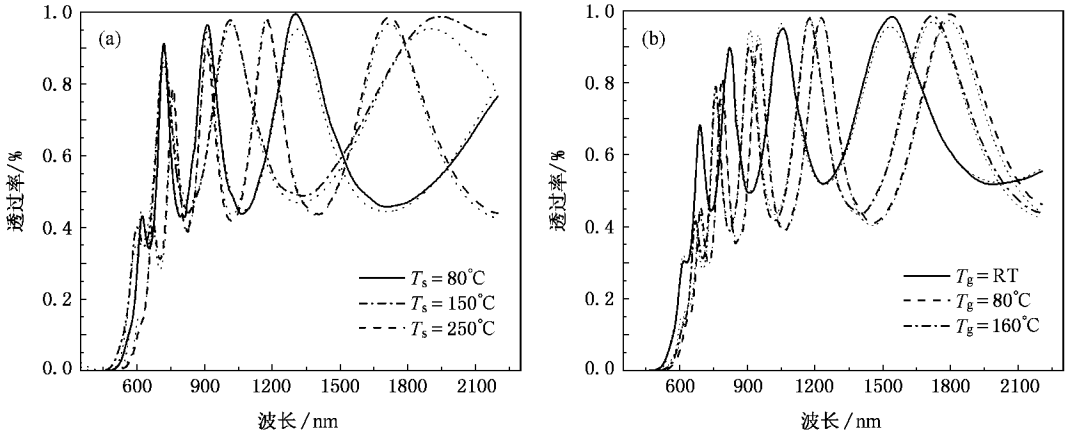


图 2 不同  $T_s$ (a) 和  $T_g$ (b) 制备的 a-Si:H 薄膜的椭圆透射谱,由点组成的线分别是相应计算的透射谱

表 1 椭圆透射法测得的 a-Si:H 薄膜厚度和表面厚度

样品序号	薄膜厚度/nm	表面厚度/nm	备注
$T_s = 80^\circ\text{C}$	302	20	
$T_s = 150^\circ\text{C}$	406	8	$T_g = 80^\circ\text{C}$
$T_s = 250^\circ\text{C}$	513	6	
$T_g = \text{RT}$	619	2	
$T_g = 80^\circ\text{C}$	513	6	$T_s = 250^\circ\text{C}$
$T_g = 160^\circ\text{C}$	483	9	

从图 2 和表 1 可知,当  $T_g = 80^\circ\text{C}$  时,随着  $T_s$  的提高,沉积相同时间后 a-Si:H 薄膜的厚度增加,表面厚度减小;当  $T_s = 250^\circ\text{C}$  时,随着  $T_g$  的升高, a-Si:H 薄膜的厚度减小,表面厚度增加.从表 1 可知,  $T_s$  和  $T_g$  越接近,薄膜的厚度越小,表面厚度越大,薄膜表面越粗糙.我们在实验中发现,若这两个温度越接近,等离子体中越容易生成粉末,颗粒较大的粉末被排除在等离子体之外而无法沉积到上面基片上,从而使得薄膜生长速度变慢,表面质量变坏.

a-Si:H 薄膜折射率的大小通常取决于薄膜中 Si:H 和微孔的含量,所以它与 PECVD 工艺紧密相关.图 4 给出了根据椭圆透射谱计算得到的  $T_s$ (图 4

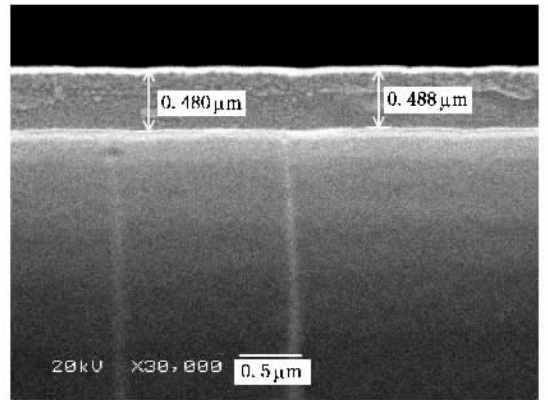


图 3 a-Si:H 薄膜 SEM 截面图( $T_s = 250^\circ\text{C}$ ,  $T_g = 80^\circ\text{C}$ )

(a) 和  $T_g$ (图 4(b)) 条件下 a-Si:H 薄膜折射率与波长之间的关系.从图 4(a) 可以看出,随着  $T_s$  从  $80^\circ\text{C}$  提高到  $250^\circ\text{C}$ , a-Si:H 薄膜的折射率随之增大,这与 Zamani 等人<sup>[10]</sup> 的研究结果基本一致.从图 4(b) 可以看出,随着  $T_g$  从室温 RT 提高到  $160^\circ\text{C}$ , a-Si:H 薄膜的折射率随之增大.根据 Demichelis<sup>[11]</sup> 理论,薄膜的折射率随 H 含量的减小而增大.由此可以推断: $T_s$  和  $T_g$  上升, a-Si:H 薄膜中 H 的含量减小.

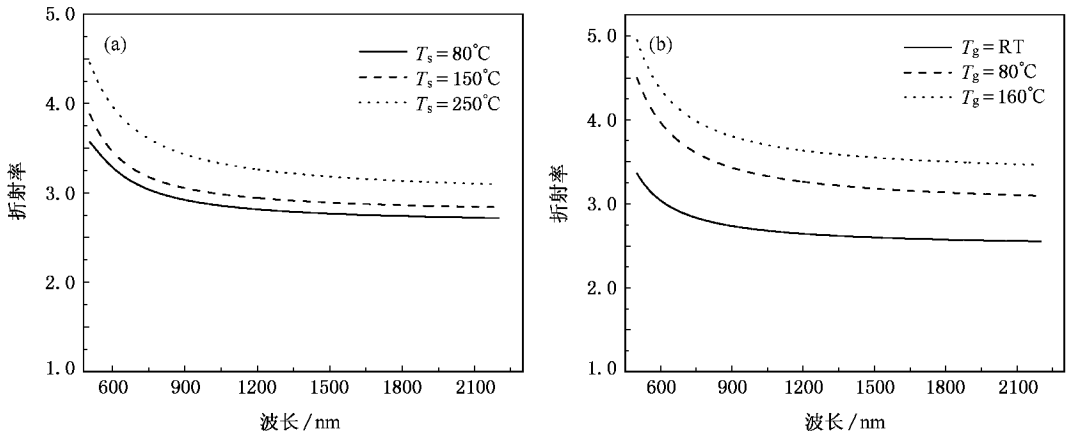
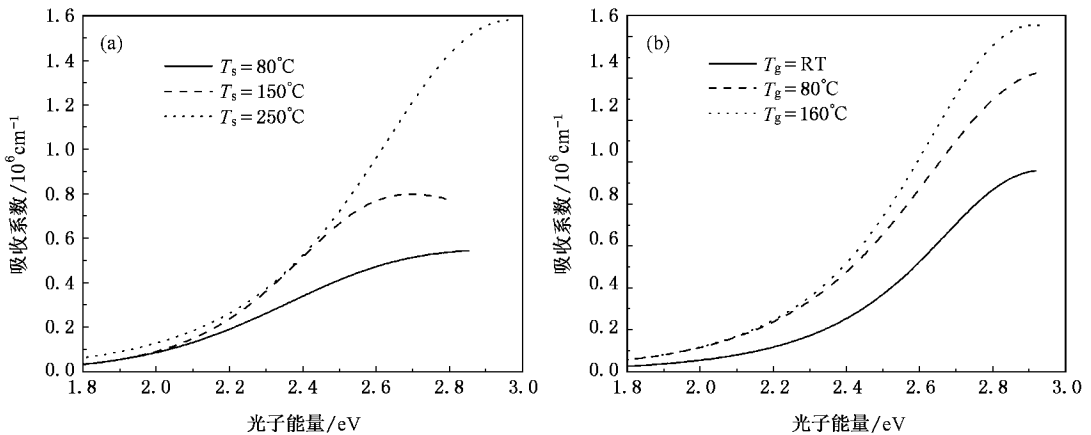
图4 不同  $T_s$ (a) 和  $T_g$ (b) 制备的 a-Si:H 薄膜折射率与波长的关系

图 5 给出了从透射谱推导得到的 a-Si:H 薄膜吸收系数  $\alpha$  与光子能量  $E$  之间的关系. 可以看出, 光子能量  $E > 2.2$  eV 时的吸收系数表现出较大的差异, 而光子能量  $E < 2.2$  eV 时的吸收系数差异较小. 随着  $T_s$  和  $T_g$  的升高, a-Si:H 薄膜的吸收系数都逐渐增大. 光子能量  $E < 2.2$  eV 的次带吸收与悬挂键密度有明确的关系<sup>[12,13]</sup>, 这种增大的次带吸收起因

于材料中的悬挂键吸收. Jackson 等<sup>[12]</sup> 研究发现, 随着无氢 a-Si 薄膜的氢化, 这种次带吸收可以降低两个数量级. 另外, a-Si:H 薄膜中有效载流子吸收的增加也会导致次带吸收的增加<sup>[14]</sup>. 本文中, 由于 PECVD 制备工艺的不同, a-Si:H 薄膜中的悬挂键浓度和有效载流子数量可能有较大的差异, 从而造成了低光子能量吸收系数的差异.

图5 不同  $T_s$ (a) 和  $T_g$ (b) 制备的 a-Si:H 薄膜吸收系数与光子能量的关系

光学带隙 ( $E_{opt}$ ) 是 a-Si:H 薄膜导带和价带之间的能量差异. 根据文献<sup>[15]</sup>, 可以由吸收系数计算得到光学带隙, 表达式为

$$(\alpha h\nu)^2 = B(h\nu - E_{opt}), \quad (11)$$

其中  $\alpha$  是吸收系数,  $h\nu$  是光子能量,  $B$  是修正系数. 在吸收边线性区域, 利用  $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$  作图并令  $(\alpha h\nu)^2 = 0$ , 就可以求出 a-Si:H 薄膜的  $E_{opt}$  值(表 2). 从表 2 可以看出, 本文制备的 a-Si:H 薄膜的  $E_{opt}$  在 1.6—2.0 eV 之间. 在其他条件相同时, 当  $T_s$  从 80°C 升高到 250°C,  $E_{opt}$  从 1.655 eV 增加到 1.912 eV,

这可能是  $T_s$  的升高导致 a-Si:H 薄膜定域态变窄而引起  $E_{opt}$  变大.  $T_g$  对  $E_{opt}$  的影响没有这么明显. 文献报道用 PECVD 制备的 a-Si:H 薄膜的  $E_{opt}$  在 1.69—2.46 eV 之间<sup>[16,17]</sup>, 与本文的结果是基本一致的.

表 2 a-Si:H 薄膜的光学带隙  $E_{opt}$ 

样品序号	$E_{opt}/\text{eV}$	样品序号	$E_{opt}/\text{eV}$
$T_s = 80^\circ\text{C}$	1.655	$T_g = \text{RT}$	2.042
$T_s = 150^\circ\text{C}$	1.831	$T_g = 80^\circ\text{C}$	1.912
$T_s = 250^\circ\text{C}$	1.912	$T_g = 160^\circ\text{C}$	1.988

## 5. 结 论

利用椭圆透射谱测量了 PECVD 法制备的玻璃基片上 a-Si:H 薄膜的厚度和光学参数,分析了基片温度  $T_s$  和辉光放电前气体温度  $T_g$  对薄膜厚度、折射率、吸收系数和光学带隙的影响,并用扫描电镜验

证了薄膜厚度. 研究结果与其他学者用其他方法研究报道的情形基本一致. 这种方法同样适用于生长在透明基片上的其他非晶或多晶薄膜.

本文在完稿之前得到了电子科技大学光电信息学院叶玉堂教授和朱大勇教授的指点,在此特别感谢.

- 
- [ 1 ] Tissot J L , Rothan F , Vedel C , Vilain M , Yon J J 1998 *Proc. SPIE* **3379** 139
- [ 2 ] Rovira P I , Ferlanto A S , Koh J , Wronsky C R , Collins R W 2000 *J. Non-Cryst. Solids* **279** 266
- [ 3 ] Swanepoel R 1983 *J. Phys. E : Sci. Instrum.* **16** 1214
- [ 4 ] Swanepoel R 1984 *J. Phys. E : Sci. Instrum.* **17** 896
- [ 5 ] McClain M , Feldman A , Kahanner D , Ying X 1991 *Computers in Phys.* **5** 45
- [ 6 ] Mulato M , Chambouleyron I , Birgin E G , Martínez J M 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 2133
- [ 7 ] Ozvold M , Mrafko P , Gašparik V 2003 *Proc. SPIE* **5024** 160
- [ 8 ] Richards B S , Lambert A , Sproul A B 2004 *Thin Solid Films* **460** 247
- [ 9 ] Birgin E G , Chambouleyron I , Martínez J M 1999 *J. Comput. Phys.* **151** 862
- [ 10 ] Zarnani H , Demiryont H , Collins G J 1986 *J. Appl. Phys.* **60** 2523
- [ 11 ] Demichelis F , Minetti-Mezzetti E , Tagliaferro A , Tresso E , Rava P , Ravindra N M 1986 *J. Appl. Phys.* **59** 611
- [ 12 ] Jackson W B , Johnson N M , Biegelson D K 1983 *Appl. Phys. Lett.* **43** 195
- [ 13 ] Siebke F , Stiebig H , Abo-Arais A , Wagner H 1996 *Energy Materials & Solar Cells* **41-42** 529
- [ 14 ] Street R A , Zesch J , Thompson M J 1983 *Appl. Phys. Lett.* **43** 672
- [ 15 ] Tauc J , Grigrovici R , Vancu A 1966 *Phys. Status Solidi* **15** 627
- [ 16 ] Myburg G , Swanepoel R 1987 *J. Non-Cryst. Solids* **89** 13
- [ 17 ] Furukawa S , Matsumoto N 1985 *Phys. Rev. B* **31** 2114

# Thickness and optical constant determination of hydrogenated amorphous silicon thin film from transmittance spectra of ellipsometer

Liao Nai-Man<sup>1)†</sup> Li Wei<sup>1)</sup> Jiang Ya-Dong<sup>1)</sup> Kuang Yue-Jun<sup>2)</sup> Qi Kang-Cheng<sup>2)</sup> Li Shi-Bin<sup>2)</sup> Wu Zhi-Ming<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> *State Key Laboratory of Electronic Thin Films & Integrated Devices, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China*

<sup>2)</sup> *School of Opto-electronic Information, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China*

( Received 13 May 2007 ; revised manuscript received 14 June 2007 )

## Abstract

To cope with the problem that the thickness and optical constants of thin film can not be measured accurately when deposited on a transparent substrate due to the incoherent reflected-light from the back-side of the substrate, a method is presented to determine the thickness and optical constants of hydrogenated amorphous silicon ( a-Si :H ) thin films deposited by plasma-enhanced chemical vapor deposition ( PECVD ) from the transmittance spectra of ellipsometer only. The influence of the substrate temperature (  $T_s$  ) and the gas temperature (  $T_g$  ) before glow discharge on the thickness and optical constants of a-Si :H thin films is analysed. The results show that the thickness of a-Si :H thin films determined by transmittance spectra agrees well with that measured by scanning electron microscopy ( SEM ). The optical constants of the films deduced from the transmittance spectra accord with the results obtained by other researchers. This method can be applied in deposition of amorphous or polycrystal thin films on transparent substrates.

**Keywords** : ellipsometry , transmittance , optical constants , hydrogenated amorphous silicon thin films

**PACC** : 0760F , 4225B , 7820D , 6140

† E-mail : liaonaiman@sohu.com