

# 磷化铟复合沟道高电子迁移率晶体管击穿特性研究\*

李 潇<sup>1)2)</sup> 张海英<sup>2)</sup> 尹军舰<sup>2)</sup> 刘 亮<sup>2)</sup> 徐静波<sup>2)</sup> 黎 明<sup>2)</sup> 叶甜春<sup>2)</sup> 龚 敏<sup>1)</sup>

1) 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

2) 中国科学院微电子研究所, 北京 100029)

(2006 年 11 月 14 日收到, 2006 年 11 月 24 日收到修改稿)

用密度梯度量子模型定量研究了磷化铟(InP)复合沟道高电子迁移率晶体管(HEMT)的击穿特性,考虑了复合沟道内碰撞电离以及沟道量子效应,重点研究了器件击穿电压随 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 沟道厚度的变化关系,提出了提高击穿电压的方法,采用商用器件模拟软件 Sentaurus 模拟了器件的开态击穿电压,对比了实验和模拟的结果.研究表明,适当减小 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 沟道层的厚度可以在保持器件饱和电流基本不变的前提下大幅度提高开态击穿电压,这对于提高 InP 基 HEMT 的功率性能具有重要意义.

关键词:磷化铟,高电子迁移率晶体管,密度梯度模型,击穿

PACC: 7280E, 7360L, 6185

## 1. 引 言

随着信息技术向数字化,网络化方向的迅速发展,对超大容量信息传输,超快实时信息处理和超高密度信息存储提出了越来越高的要求,InP 基纳米栅高电子迁移率晶体管(HEMT)被公认是在 40—100 Gb/s 传输速率的光纤通信用电路及微波,毫米波以及亚毫米波无线通信应用的首选.就衬底材料而言,InP 与 GaAs 相比,击穿电场、热导率、电子饱和速率均更高.用它制作的 HEMT 器件的截止频率已经达到了 562 GHz<sup>[1]</sup>,这是目前三端器件的最高水平.用 InP 基 HEMT 制作的低噪声放大器,压控振荡器等都具有其他器件不可比拟的优越性<sup>[2]</sup>.

InP 衬底 HEMT 的优点是工作频率极高但噪声极低,缺点是 InGaAs 沟道 HEMT 的耐击穿电压低,从而限制了其功率应用.为了在保持器件高频性能的基础上提高耐压能力,人们采用了 InGaAs/InP 复合沟道结构<sup>[2]</sup>.

$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  具有很高的电子迁移率(室温时可达  $13000\text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ),InP 具有很高的电子峰值漂移速度( $2.5 \times 10^7\text{ cm/s}$ )<sup>[3]</sup>,InP 的电离阈值能量(1.69 eV)比  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  (0.92 eV)高<sup>[4]</sup>,所以耐电压击穿能力比  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  强.这种结构综合利用

了低电场时 InGaAs 的高电子迁移率特性及高电场时 InP 的高电离阈值能量和高饱和速率,既提高了 HEMT 的漏极-源极击穿电压,也保证了其优良的毫米波频率特性.

对于 InP 基复合沟道 HEMT 的击穿特性国外虽已有报道,但仅限于实验数据,并没有进行定量的理论分析和计算,为了用理论指导器件结构优化设计,我们对此开展了研究.

本文首先介绍复合沟道 HEMT 及其特点,然后用器件模拟软件 Sentaurus 仿真了器件的开态击穿电压,对比了实测的和仿真的数据,研究结果表明:适当减小  $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$  沟道层的厚度可以在保持器件饱和电流基本不变的前提下大幅度提高开态击穿电压,这对于提高 InP 基 HEMT 的功率性能具有重要意义.

## 2. InP 复合沟道 HEMT

### 2.1. InP 基复合沟道 HEMT 击穿电压高的原因

InP 衬底 HEMT 的优点是工作频率极高但噪声极低,缺点是  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  沟道 HEMT 的耐压较低.这是由于在强电场下,窄禁带宽度的  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  ( $E_g = 0.75\text{ eV}$ )<sup>[3]</sup>沟道中存在着强烈的碰撞电离<sup>[5]</sup>.

\* 国家自然科学基金(批准号:60276021)和国家重点基础研究规划(批准号:G2002CB311901)资助的课题.

碰撞电离将产生很多消极的影响,例如降低导通态和截止态的击穿电压,增加输出电导,和引起 Kink<sup>[5]</sup>效应. 减少碰撞电离的一种方法是降低 InGaAs 沟道中 In 的组分,提高沟道的禁带宽度,从而提高 HEMT 的击穿电压,然而,在降低 In 组分的同时也降低了 InGaAs 中的电子迁移率,从而降低了 HEMT 的截止频率. 使用宽禁带的 InP ( $E_g = 1.35 \text{ eV}$ )<sup>[3]</sup>作为 HEMT 沟道可以大幅度提高器件漏极-源极击穿电压,因为 InP 在高电场下具有很高的饱和电子漂移速度( $2.510 \times 10^7 \text{ cm/s}$ )<sup>[3]</sup>,但在低电场下的电子迁移率( $5400 \text{ cm}^2(\text{V}\cdot\text{s})$ )<sup>[3]</sup>却比  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  ( $13000 \text{ cm}^2(\text{V}\cdot\text{s})$ )<sup>[3]</sup>低得多,从而降低了 HEMT 在毫米波段的增益和附加效率,为兼顾 HEMT 的漏极-源极击穿电压和频率性能,人们用 InGaAs/InP,共同形成 HEMT 的导电沟道. 这种结构综合应用了低电场时  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  的高电子迁移率特性及高电场时 InP 的高电离阈值能量和高饱和速率,既提高了 HEMT 的漏极-源极击穿电压,也保证了其优良的毫米波频率特性.

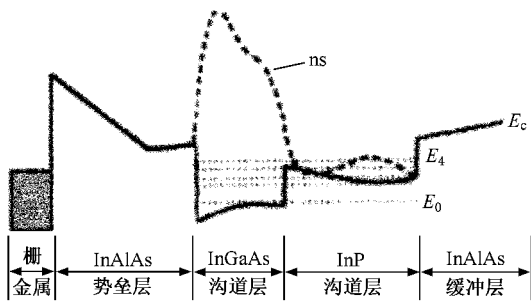


图 1 栅下靠源端势能和电子浓度( $n_s$ )分布情况

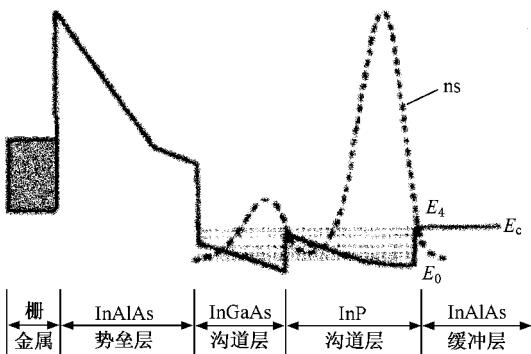


图 2 栅下靠漏端势能和电子浓度分布情况

## 2.2. 复合沟道中势能和电子浓度分布

当  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  沟道层的厚度减小到可以与电

子的德布罗意波长相比拟时,电子的波粒二象性表现出来,主要表现为在沟道中沿平行于异质结平面方向的电子状态量子化,在源侧低电场区,电子主要集中在  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  沟道层;而在靠近漏一侧的高电场区,主要集中在 InP 层,如图 1、2 所示<sup>[6]</sup>.

## 3. Sentaurus 仿真复合沟道 HEMT 击穿

### 3.1. 密度梯度量子模型

随着器件尺寸不断缩小,达到了深亚微米的量级,电子的波动特性将不能再被忽略,为了在仿真中计入量子效应,该模型在常规的电子密度表达式中加入一项量子势修正:

$$n = N_c \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_C - \Lambda}{k_B T}\right), \quad (1)$$

其中的  $\Lambda$  即为量子效应修正项,它的表达式为

$$\begin{aligned} \Lambda &= -\frac{\gamma \hbar^2}{12m} \left\{ \nabla^2 \log n + \frac{1}{2} (\nabla \log n)^2 \right\} \\ &= -\frac{\gamma \hbar^2}{6m} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}}, \end{aligned} \quad (2)$$

该量子模型由于其良好的收敛性以及准确度得到了广泛的运用.

### 3.2. HEMT 击穿的主要物理机理

器件击穿的主要物理机理是沟道内存在强烈的碰撞电离. 人们定义碰撞电离率<sup>[7]</sup>来描述其强弱:

$$G = \frac{1}{q} |J_n| \partial_n + \frac{1}{q} |J_p| \partial_p, \quad (3)$$

其中  $J_n, J_p$  为电子和空穴的电流密度,  $\partial_n, \partial_p$  为电子和空穴的碰撞电离系数,定义为载流子移动单位长度所产生的电子-空穴对数. 查阅文献得到:

$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  的碰撞电离系数<sup>[8]</sup>( $\text{cm}^{-1}$ )是

$$\alpha(E) = 5.13 \times 10^7 \exp(-1.95 \times 10^6/E), \quad (4)$$

$$\beta(E) = 7.30 \times 10^7 \exp(-2.02 \times 10^6/E). \quad (5)$$

InP 的碰撞电离系数<sup>[9]</sup>( $\text{cm}^{-1}$ )是

$$\alpha(E) = 1.12 \times 10^7 \exp(-3.11 \times 10^6/E), \quad (6)$$

$$\beta(E) = 4.79 \times 10^6 \exp(-2.55 \times 10^6/E), \quad (7)$$

其中  $\alpha, \beta$  分别是电子和空穴的碰撞电离系数,  $E$  是电场强度

### 3.3. Sentaurus 仿真 HEMT 击穿

目前,在器件工艺和材料结构模拟仿真中主要

采用两种模型,一种是从微观角度考虑的蒙特卡罗模型(MC),另一种是从宏观角度考虑的漂移扩散模型(DD). MC能够更精确地模拟沟道2DEG的输运特性,但计算时间过长,考虑到DD模型既能很好满足器件模拟需要同时模拟时间又不至于太长,因此选用了DD模型. 通过固定栅压不断加漏压,得到器件的击穿特性.

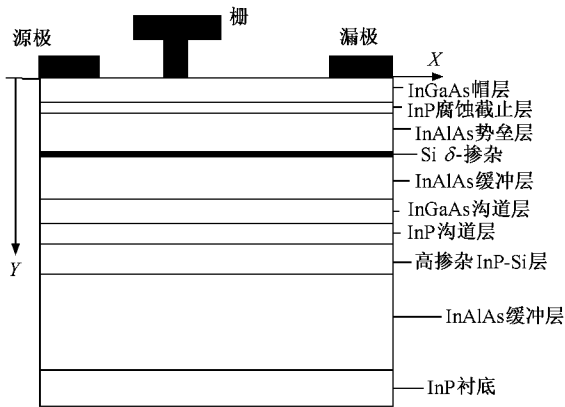


图3 仿真所采用的器件结构

仿真所用的器件结构如图3所示,为了得到器件在考虑沟道量子效应后击穿电压随不同 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 沟道层厚度的关系,采用了两种 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 沟道厚度的结构进行仿真. 在两层沟道内分别使用相应的击穿模型(4)~(7)式,利用Sentaurus提供给用户的物理模型接口(Physical Model Interface)将上述表达式写入,同时在 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 沟道中加入密度梯度量子模型来模拟其中的量子效应,最后得到的开态击穿特性如图4所示.

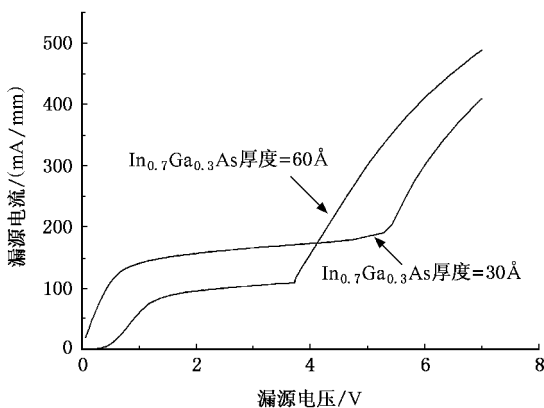


图4 开态击穿特性( $V_{gs} = 0\text{V}$ )

## 4. 仿真结果分析

如图3所示,器件结构至下而上分别为InP衬底,InAlAs缓冲层,高掺杂InP层,InP沟道层,InGaAs沟道层,InAlAs隔离层,InAlAs势垒层,InP腐蚀截止层. 在势垒层与缓冲层之间有一Si平面掺杂层作为二维电子气的提供层,为提高电子的低场迁移率,InGaAs沟道层的In组分取为0.7,仿真所用两种材料除 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 沟道厚度分别为 $30\text{Å}$ 和 $60\text{Å}$ 以外其他结构完全相同.

从仿真结果可以看出,当器件处于导通状态(开态)时, $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 厚度为 $30\text{Å}$ 的器件击穿电压为 $5.38\text{V}$ ,而厚度为 $60\text{Å}$ 的器件为 $3.75\text{V}$ . 该层厚度为 $30\text{Å}$ 的器件的击穿电压明显高于 $60\text{Å}$ 的器件.

因为随着 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 层厚度的减小,其中的量子效应将会变得更为显著,在高场下更多的电子将从高碰撞电离系数的 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 层往低碰撞电离系数的InP层转移,从而提高了击穿电压,但并不能无限地减小该层厚度以进一步提高击穿电压,主要受以下两方面原因的限制:1)我们采用复合沟道的目的是为了在保持器件高频性能的基础上提高击穿电压以提高器件的功率性能,如果 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 层厚度进一步减小,将导致电子的低场迁移率下降,从而造成截止频率的下降,所以并不能无限地减小该层的厚度. 2)现阶段材料外延生长技术较难生长出 $30\text{Å}$ 以下平整的外延层,厚度越薄,生长表面的轻微的不平整将对载流子产生散射,二维电子气的迁移率随之降低,从而降低了器件的饱和电流和跨导.

所以在材料结构的设计中应将这些因素综合考虑.

## 5. 实验

用于实验的材料结构为图3所示的两种外延片,除 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 沟道厚度分别为 $30\text{Å}$ 和 $60\text{Å}$ 以外其他结构完全相同,做成器件后,在HP4155A半导体参数测试仪上测得的两种结构器件的开态击穿特性如图5和图6所示.

## 6. 实验结果分析

如图5,图6所示,适当减小 $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$ 沟道层

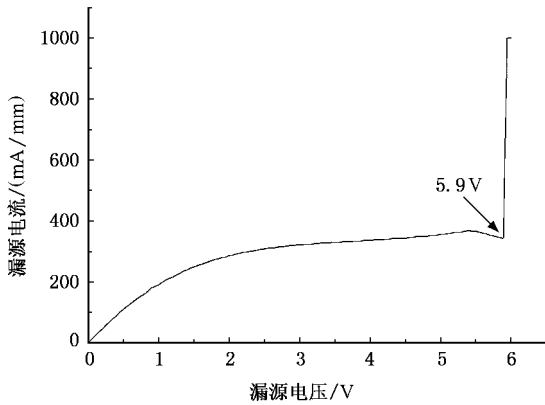


图5  $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$  厚度为  $60\text{Å}$  器件的开态击穿电压

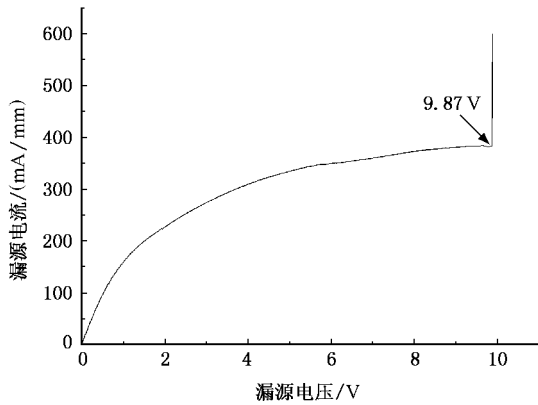


图6  $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$  厚度为  $30\text{Å}$  器件的开态击穿电压

厚度可以在保持器件饱和电流基本不变的前提下大

幅度提高开态击穿电压,其中  $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$  沟道厚度为  $30\text{Å}$  器件的开态击穿电压达到了  $9.87\text{V}$ ,远高于  $60\text{Å}$  的器件( $5.9\text{V}$ ),提高了大约  $67.2\%$ ,但饱和电流(约  $370\text{mA/mm}$  栅宽)与  $60\text{Å}$  器件(约  $350\text{mA/mm}$  栅宽)相比并没有明显变化,所以器件的功率特性将得到大幅度提高.测得的结果与仿真所得的结果有一定差异,主要有两方面原因:1)仿真采用的已报道的碰撞电离模型适用范围是场强在  $100\text{kV/m}$  的场合,而器件内部的场强一般是  $20\text{—}25\text{kV/m}$  的范围,这造成了一定的误差.2)与硅器件不同,目前用于化合物半导体器件的很多模型不完善,造成仿真结果与实验数据有差距.

## 7. 结 论

本文利用商用器件模拟软件 Sentaurus 定量研究了磷化铟复合沟道高电子迁移率晶体管(HEMT)的开态击穿特性,考虑了复合沟道内的碰撞电离,用密度梯度量子模型描述了  $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$  沟道内的量子效应,仿真结果表明  $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$  沟道厚度为  $30\text{Å}$  的器件的开态击穿电压明显高于厚度为  $60\text{Å}$  的器件而饱和电流基本保持不变,实测数据表明了仿真结果的正确性.得到了提高  $\text{InP}$  基复合沟道 HEMT 器件击穿电压的办法,为解决  $\text{InP}$  基 HEMT 漏-源击穿电压较低的问题提出了一种方法,给器件的功率应用开辟了广阔前景.

- [1] Yamashita Y, Endoh A, Shinohara K, Hikosaka K, Matsui T 2002 *IEEE Electron Dev. Lett.* **13** 573
- [2] Li X, Liu L, Zhang H Y, Ying J J, Li H O, Ye T C, Gong M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3617 (in Chinese) [李 潇、刘 亮、张海英、尹军舰、李海鸥、叶甜春、龚 敏 2006 物理学报 **55** 3617]
- [3] Deng Z J, Zheng A S 2004 *Semiconductor Materials* (Beijing: Chemical Industry Press) 57/103 (in Chinese) [邓志杰、郑安生 2004 半导体材料(北京:化工出版社) 57/103]
- [4] Boudrissa M, Delos E, Wallaert X, Theron D, and De Jaeger J C 2001 *International Conference on Indium Phosphide and Related Materials Conference Proceedings* 196
- [5] Liu H X, Hao Y, Zhang T, Zheng X F, Ma X H 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2242 (in Chinese) [刘红侠、郝 跃、张 涛、郑雪峰、马晓华 2003 物理学报 **52** 2242]

- [6] Enoki T, Arai K, Kohzen A, Ishii Y 1995 *IEEE Transactions on Electron Devices* **42** 1414
- [7] Zhang X S, He X P, Li Z J 1991 *Chinese Journal of Semiconductors* **14** 292 (in Chinese) [张锡盛、何新平、李志坚 1991 半导体学报 **14** 292]
- [8] Osaka F, Mikawa T, Kaneda T 1985 *IEEE Journal of Quantum Electronics* **21** 1334
- [9] Bulman G E, Cook L W, Tashima M M, Stillman G E 1981 *IEEE* **81** 291



# Research of breakdown characteristic of InP composite channel HEMT \*

Li Xiao<sup>1)2)</sup> Zhang Hai-Ying<sup>2)</sup> Yin Jun-Jian<sup>2)</sup> Liu Liang<sup>2)</sup> Xu Jing-Bo<sup>2)</sup> Li Ming<sup>2)</sup> Ye Tian-Chun<sup>2)</sup> Gong Min<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> *College of Physics Science and Technology of Sichuan University ,Chengdu 610064 ,China )*

<sup>2)</sup> *Institute of Microelectronics of Chinese Academy of Sciences ,Beijing 100029 ,China )*

( Received 14 November 2006 ; revised manuscript received 24 November 2006 )

## Abstract

Density gradient quantum model has been used to analyse the breakdown characteristic of InP-based composite channel HEMT( high electron mobility transistor ). The collision ionization in composite channel and quantum effect has been taken into consideration. We payed great attention to the relationship of on-state breakdown voltage with respect to the thickness of  $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$  channel , and promoted a method to enhance the on-state breakdown voltage . A commercial 2D-device simulation program. Sentaurus has been used to simulate the on-state breakdown voltage of the device. A comparison has been made between the result of simulated and measured data. The result shows that with the reduction of the thickness of  $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As}$  channel , on-state breakdown voltage of the device will be enhanced greatly without reducing saturation current , which has a significant meaning for promoting the power performance of InP-based HEMT.

**Keywords :** InP , high electron mobility transistor , density gradient model , breakdown

**PACC :** 7280E , 7360L , 6185

\* Project supported by the National Natural Sciences Foundation of China( Grant No. 60276021 ) and the State Development Program of China( Grant No. G2002CB311901 ).

# 沉积温度对微晶硅薄膜结构特性的影响\*

陈永生<sup>†</sup> 郜小勇 杨仕娥 卢景霄 谷锦华

(郑州大学物理工程学院材料物理重点实验室, 郑州 450052)

(2006 年 9 月 11 日收到, 2006 年 12 月 8 日收到修改稿)

采用 PECVD 技术, 在玻璃衬底上沉积  $\mu\text{c-Si:H}$  薄膜. 用拉曼光谱、SEM 和 UV 分光光度计对不同沉积温度下沉积的薄膜的结构特性进行分析. 研究发现: 沉积温度较低时, 随着沉积温度的升高, 薄膜的晶化率增加; 当沉积温度超过某一温度值时, 随着温度的进一步升高, 薄膜的晶化率降低. 这时, 表面反应由表面扩散限制转变为流量控制. 该温度值随着硅烷含量的降低而降低.

关键词: 氢化微晶硅薄膜, 拉曼散射谱, 晶化率, UV 分光光度计

PACC: 7280N, 7830G, 8115H

## 1. 引 言

采用 PECVD 方法沉积的微晶硅( $\mu\text{c-Si:H}$ )薄膜广泛应用于薄膜器件如太阳能电池、薄膜晶体管(TFT)传感器等<sup>[1,2]</sup>. 本征  $\mu\text{c-Si:H}$  薄膜作为 a-Si 薄膜太阳能电池的活性层具有重要意义: 1) 可以缓解光致衰减; 2) 增强了对太阳光谱中长波长光区的光谱响应. 实验组对微晶硅薄膜的沉积进行了大量的研究<sup>[3,4]</sup>. 本文对不同沉积温度下制备的  $\mu\text{c-Si:H}$  薄膜的微结构进行了分析.

## 2. 实 验

采用中科院设计的星型 PECVD 沉积系统的 I 室来制备  $\mu\text{c-Si:H}$  薄膜. 反应气体为  $\text{SiH}_4$  和  $\text{H}_2$  混合气体, 比例  $R = \text{SiH}_4/(\text{SiH}_4 + \text{H}_2)$  分别为 3% 和 5%. 沉积温度在 200—450°C 范围内变化; 沉积气压为 133.3 Pa, 射频功率为 50 W, 电极间距为 2 cm. 射频电源的激发频率为 13.56 MHz, 衬底为石英玻璃, 清洗采用丙酮和酒精, 并且作超声波处理. 薄膜厚度保持在 600 nm 左右. 拉曼散射(仪器为 Renishaw 2000)和积分 UV 反射(仪器为 UV 分光光度计 UV-3150)用于分析薄膜的晶化情况, SEM(设备为冷场发射扫描电子显微镜 JSM-6060)观察薄膜的表面形貌.

## 3. 结 果

### 3.1. 拉曼分析

图 1 为  $R = 5\%$  时, 在不同沉积温度下制备的薄膜的拉曼光谱图. 采用高斯函数对每个样品的拉曼谱进行三峰拟合分析, 通过计算相应峰面积比来表征其晶化率:

$$X_c = (I_{510} + I_{520}) / (I_{520} + I_{510} + I_{480}),$$

式中,  $I_{520}$  为 520  $\text{cm}^{-1}$  附近的晶硅结构散射峰面积;  $I_{480}$  为 480  $\text{cm}^{-1}$  附近的非晶结构散射峰面积; 510  $\text{cm}^{-1}$  附近的峰为晶粒间界,  $I_{510}$  表示其积分强度<sup>[5]</sup>. 图 2 为衬底温度分别为 350°C、400°C 时沉积的薄膜的拉曼谱三峰拟合情况. 图 3 为硅烷浓度  $R$  分别为 3%、5% 时薄膜的晶化率、拉曼谱中晶硅峰半峰宽与衬底温度的关系图. 从图中可以发现, 在较低沉积温度时, 随着沉积温度的升高, 薄膜的晶化率增加, 并在某一温度值达到最大值; 其后, 随着沉积温度的继续升高, 晶化率下降. 对于不同的硅烷浓度, 此最大晶化率温度值不同, 并随着硅烷浓度的降低而降低. 而晶硅峰半峰宽则表现为完全相反的趋势, 随着沉积温度的升高而减小, 并在某一温度值达到最小值; 此后随着温度的继续升高而增大. 该温度值与晶化率最大温度值保持一致. 晶硅峰半峰宽

\* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2006CB202601)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: chysh2003@zzu.edu.cn

的大小与晶粒尺寸、薄膜的晶化率等有直接的关系，其随着薄膜晶粒尺寸和晶化率的增大而减小，峰更加尖锐。

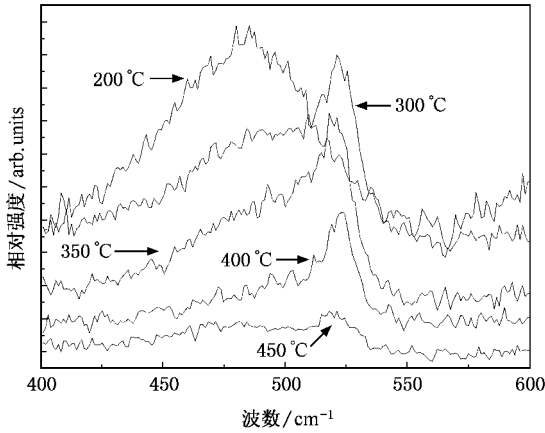


图1 R = 5% 时,不同沉积温度下薄膜的拉曼光谱图

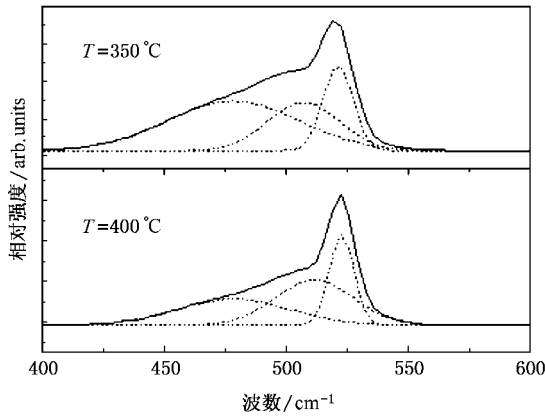


图2 沉积温度为 350°C 400°C 时,薄膜的拉曼谱三峰拟合图

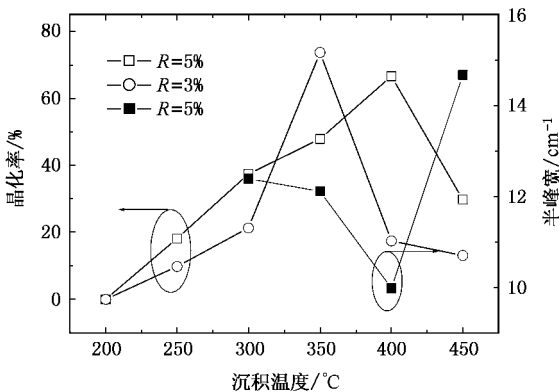


图3 不同沉积温度下薄膜的晶化率、半峰宽关系

### 3.2. UV 反射

图4为R = 5%时不同沉积温度下薄膜的短波积分反射谱图(UV区 250—400 nm)。图中实线为抛光单晶硅的理论UV反射谱。短波反射光主要来源于薄膜的近表面反射,因此UV反射可以反映薄膜表面的微结构特性。当沉积温度为200°C,薄膜的UV反射率随着波长的增大而单调降低,表现为明显的非晶结构。当沉积温度在300—400°C范围内时,薄膜的UV反射谱图与单晶硅的反射曲线相似:在367 nm(“e<sub>1</sub>”)和274 nm(“e<sub>2</sub>”)附近出现两反射峰。这表明薄膜表面为微晶结构。当沉积温度为450°C时,274 nm附近的反射峰红移至290 nm附近,暗示薄膜的结构向非晶过渡。样品的UV反射特性说明薄膜的微结构变化趋势和拉曼谱图相一致。不同薄膜的反射率的大小的不同主要与表面的氧化层、表面粗糙度等有关<sup>[6,7]</sup>。

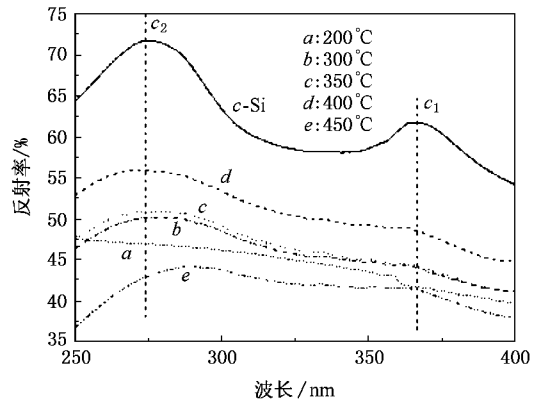


图4 R = 5% 时,不同沉积温度下薄膜的UV反射谱

### 3.3. SEM 形貌

图5为不同沉积温度下制备的薄膜的SEM表面形貌图。当沉积温度从300°C升高到350°C时,薄膜表面的粗糙度增加,晶粒尺寸变得不规则。当沉积温度为300°C时,晶粒大小均匀,尺寸为20 nm左右;当沉积温度升高到400°C时,晶粒大小不一,尺寸大的到200 nm左右,小的为50 nm左右。当沉积温度为450°C时,薄膜表面平整,晶粒大小如一,保持在70 nm左右。

## 4. 讨 论

采用PECVD技术,通过SiH<sub>4</sub>和H<sub>2</sub>混合气体沉

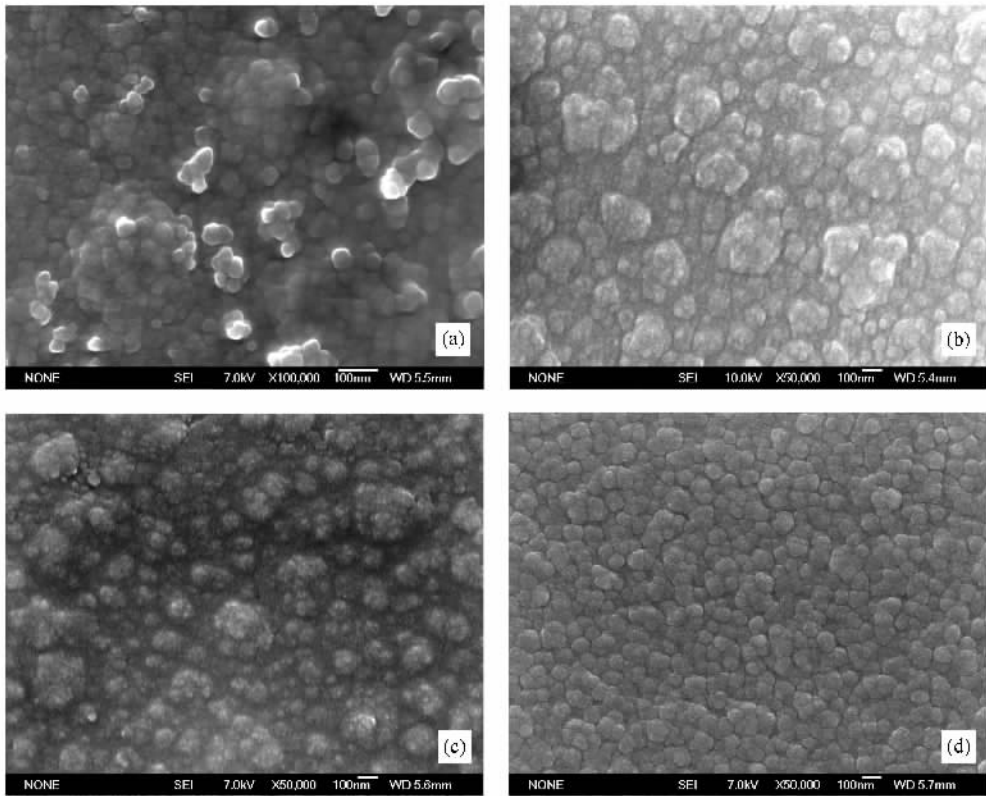


图 5  $R = 5\%$  时, 薄膜的 SEM 形貌图 (a) 300°C (b) 350°C (c) 400°C (d) 450°C

积微晶硅薄膜时, 在等离子体中产生的自由基有  $\text{SiH}_3$ ,  $\text{SiH}_2$ ,  $\text{SiH}$  和  $\text{H}$  原子等. 其中  $\text{SiH}_3$  和  $\text{H}$  原子解离能小而大量存在.  $\text{SiH}_3$  自由基由于能对解离前的正四面体保持较好, 且解离能小、寿命长, 因而其被认为是沉积微晶硅薄膜的主要基团<sup>[8]</sup>. 在制备微晶硅薄膜时,  $\text{H}_2$  的含量很高, 因此假设薄膜生长表面被  $\text{H}$  原子完全钝化. 该钝化过程为一动态过程: 表面的  $\text{H}$  原子不断脱附, 来自于等离子体中的  $\text{H}$  原子不断被吸附, 保持表面被  $\text{H}$  原子覆盖.

图 6 为微晶硅薄膜生长过程模拟图. 该生长过程分为 3 个过程: 1) 等离子体产生的  $\text{SiH}_3$  自由基物理吸附于薄膜生长表面. 2) 表面钝化  $\text{H}$  原子通过脱附产生活性点(即悬键), 该活性点可分为结晶活性点和非晶活性点. 这些活性点可再一次被  $\text{H}$  原子钝化. 3) 物理吸附于表面的  $\text{SiH}_3$  在活性点钝化之前能扩散至该活性点, 则形成稳定的化学键, 使薄膜得以生长.

表面钝化  $\text{H}$  原子一方面可由  $\text{SiH}_3$  自由基和  $\text{H}$  原子等反应生成  $\text{SiH}_4$  和  $\text{H}_2$  等产物而脱附. 在等离子体中  $\text{H}$  原子的浓度要大大超过  $\text{SiH}_3$  自由基的浓度. 因此  $\text{H}$  原子主要通过生成  $\text{H}_2$  进行脱附; 另一

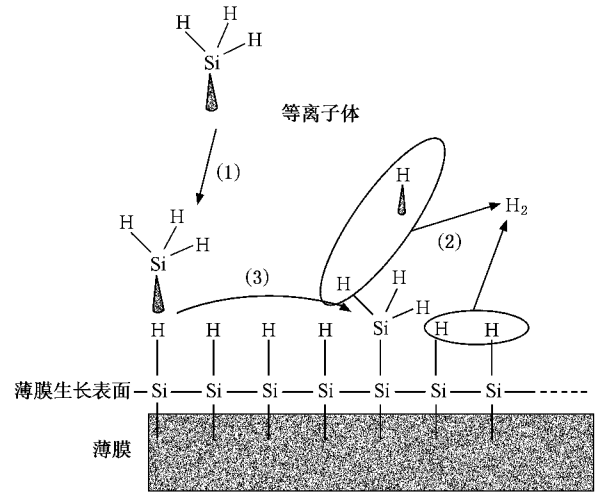


图 6 微晶硅薄膜生长过程示意图

方面, 衬底温度较高时, 表面吸附的  $\text{H}$  原子间可直接反应生成  $\text{H}_2$  而脱附. 其脱附速率  $V_d$  可粗略表示为

$$V_b \propto P_{\text{H}_2} \cdot \exp(-E_a/kT),$$

式中  $P_{\text{H}_2}$  为混合气体中  $\text{H}_2$  的分压;  $E_a$  为反应生成  $\text{H}_2$  的激活能;  $T$  为沉积温度. 该反应为热激发, 随



着H原子浓度的增加和沉积温度的升高,反应速率增大,表面的活性点密度增大。

在薄膜沉积过程中,物理吸附  $\text{SiH}_3$  基团在薄膜表面扩散  $L_d$  长度后,如遇到结晶活性点,则反应生成晶体结构,如遇到非晶活性点,则生成非晶结构。当硅烷浓度  $R$  为 5%,沉积温度为  $200^\circ\text{C}$  时,表面 H 原子的脱附速率  $V_d$  比较低,表面的活性点密度低。物理吸附于表面的  $\text{SiH}_3$  自由基在扩散至活性点之前就相互反应,使薄膜得以生长。所以薄膜中 H 含量较高,薄膜为非晶结构,随着沉积温度的升高,表面的结晶活性点密度增大, $\text{SiH}_3$  自由基团可迅速扩散至这些活性点,使晶粒得以生长,对应拉曼晶硅峰半峰宽减小。温度越高,结晶活性点密度也越大,薄膜的晶化率增加,薄膜表面的粗糙度也随之增加,并在  $400^\circ\text{C}$  时达到最大值。UV 反射谱图上  $e_1$  和  $e_2$  附近的反射峰更加突出,反应速率受表面扩散速率限制。当沉积温度超过  $400^\circ\text{C}$  时,表面的非晶活性点密

度激增,吸附的  $\text{SiH}_3$  自由基团迅速与其反应,使得扩散长度大大缩短,薄膜的晶化率降低,拉曼晶硅峰半峰宽增大,  $274\text{ nm}$  附近的反射峰红移至  $290\text{ nm}$  附近,反应速率受  $\text{SiH}_3$  自由基团流量控制。当硅烷浓度  $R$  为 3% 时,由于混合气体中  $\text{H}_2$  分压的增加,沉积温度超过  $350^\circ\text{C}$  时就可使非晶活性点密度激增,薄膜的晶化率降低。

## 5. 结 论

采用 PECVD 方法沉积  $\mu\text{c-Si:H}$  薄膜时,随着沉积温度的升高,生长过程由表面扩散限制转变为反应流量控制。此转变温度与硅烷浓度有关,随着浓度的降低而降低。低于转变温度时,随着沉积温度的升高薄膜的晶化率、表面粗糙度、晶粒不均匀性增加,高于转变温度时,薄膜的晶化率降低。

- [1] Shah A V, Meier J, Vallat-Sauvain E *et al* 2003 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **78** 469
- [2] Li J, Wu C Y, Liu J P *et al* 2006 *J. Non-Cryst Solids* **352** 1715
- [3] Gao X Y, Li R, Chen Y S *et al* 2006 *Chin. Phys. Sin.* **55** 98 (in Chinese) [ 郜小勇、李 瑞、陈永生等 2006 物理学报 **55** 98 ]
- [4] Chen Y S, Yang S E, Lu J X *et al* 2006 *Acta Ener. Solaris Sin.* **27** 116 (in Chinese) [ 陈永生、杨仕娥、卢景霄等 2006 太阳能学报

**27** 116 ]

- [5] Siebke F, Yata S, Hishikawa Y *et al* 1998 *J. Non-Cryst. Solids* **227-230** 977
- [6] Harbeke G, Jastrzebski L 1990 *J. Electrochemical Society* **137** 696
- [7] Straub A, Widenborg P I, Sproul A *et al* 2004 *J. Crystal Growth* **265** 168
- [8] Matsuda A 1983 *J. Non-Cryst. Solids* **59-60** 767

# The influence of deposition temperature on the structure of microcrystalline silicon film<sup>\*</sup>

Chen Yong-Sheng<sup>†</sup> Gao Xiao-Yong Yang Shi-E Lu Jing-Xiao Gu Jing-Hua

( Key Laboratory of Material Physics , Department of Physics , Zhengzhou University , Zhengzhou 450052 , China )

( Received 11 September 2006 ; revised manuscript received 8 December 2006 )

## Abstract

Undoped hydrogenated silicon films have been prepared from a gas mixture of silane and hydrogen , at deposition temperature varying from 200—450 °C in an ultrahigh vacuum system using RFPECVD technique. Raman scattering , SEM and UV spectrophotometer are used to analyse the structure changes of microcrystalline silicon films throughout the deposition temperature range. Results show that at lower deposition temperature , the crystalline volume fraction of  $\mu\text{c-Si:H}$  films increased with the increasing of deposition temperature. Exceeding a certain temperature , the crystalline volume fraction decreased with further increasing of deposition temperature. This is attributed to a change in the dominant film growth process from surface-diffusion-limited at low deposition temperatures to flux-limited at higher deposition temperatures.

**Keywords** : microcrystalline silicon film , Raman scattering , crystalline volume fraction , UV spectrophotometer

**PACC** : 7280N , 7830G , 8115H

<sup>\*</sup> Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China ( Grant No. 2006CB202601 ).

<sup>†</sup> E-mail : chysh2003@zzu.edu.cn