

用光热偏转光谱技术测量 a-Si:H/a-SiN_x:H 多层膜的能隙态密度

朱 美 芳

(中国科技大学研究生院物理部)

摘要——用光热偏转光谱技术测量了不同 a-Si:H 层厚度的 a-Si:H/a-SiN_x:H 多层膜(超晶格)材料的吸收光谱, 求出多层膜材料的隙态密度及其随 a-Si:H 层厚度的变化, 估算出界面态密度为 $\sim 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$, 最后估算了隙态密度的计算误差。

一、引 言

能隙态密度是表征非晶态半导体材料性质的重要参数, 通常用于隙态密度测量的电学方法有场效应方法、 $C-V$ 方法或深能级瞬态谱技术等, 但都要制备一定结构的样品, 因此不适用于非晶态半导体多层膜材料隙态密度的研究。通常用光透射谱或光反射谱技术来研究隙态密度的方法也由于在亚能隙吸收区, 当吸收系数低于 50 cm^{-1} 时测量误差过大而不可靠。如果从光电导推导光吸收谱, 则必须假定 $\eta\mu\omega$ 与光子能量无关, 这一假设在整个光谱范围并不完全成立。

光热偏转光谱^[2]是一种无电接触、非破坏性的测量技术, 具有很高的灵敏度, 可避免上述方法的局限性, 能方便而又直接地测量光吸收系数。Jackson^[3,4]等人利用光热偏转光谱技术成功地研究了 a-Si:H、a-Si_xGe_{1-x}:H 等材料的光学及电子态性质。用该技术测定的隙态密度与用电子自旋共振方法得到的结果很一致。

我们将光热偏转光谱技术应用于研究 a-Si:H/a-SiN_x:H 多层膜材料的隙态密度, 测量了隙态密度及其 a-Si:H 层厚度的变化, 并讨论了界面态对测量结果的影响。

二、实 验 方 法

光热偏转技术的基本原理是: 当介质材料受到一强调制光(激励光源)的照射时, 吸收的能量会周期性地转变成热能, 热流从受热区向周围流出, 引起介质材料本身及其周围介质(偏转介质)温度升高, 从而引起样品表面薄层内折射率的变化。用一激光束作为光探针(如

本文1986年8月15日收到。最后修改稿1986年11月20日收到。

图 1 所示), 探针将由于偏转介质折射率的变化而同步偏转, 用位置传感器检测这一周期性偏转, 传感器的输出信号 S 可由双相锁定放大器放大后观察。 S 可由下式确定:

$$S = F_r \left(\frac{1}{n_0} \right) \left(\frac{dn}{dT} \right) L \left[\frac{dT(Z_0)}{dZ} \right] e^{i\omega t} + C. C. \quad (1)$$

在一定的测量条件下, 式(1)中 F_r 、 n_0 、 $\frac{dn}{dT}$ 等都是确定的, $dT(Z_0)/dZ$ 表示垂直于样品表面的温度梯度, 它是判断样品吸收性质的重要参数。对于薄膜样品:

$$\frac{dT(Z_0)}{dZ} = \frac{K_a \exp(-K_a Z_0) I}{k_a K_a + k_s K_s} \cdot A, \quad (2)$$

其中 I 为激励光的强度, Z_0 为光探针与样品表面的垂直距离, k_a 、 k_s 分别为偏转介质与衬底的热导率, $1/K_a$ 、 $1/K_s$ 分别为偏转介质与衬底的热长度, A 为薄膜吸收, 并有

$$A = B [1 - \exp(-\alpha l)] \frac{(1 - R_F)(1 + R_B)}{1 - R_F R_B}. \quad (3)$$

在一定的测试条件下, 将 K_a 、 K_s 、 k_a 、 k_s 、 I 、 Z_0 等参数归结为一个常数 C , 则偏转信号

$$S = C [1 - \exp(-\alpha l)] \frac{(1 - R_F)(1 + R_B)}{1 - R_F R_B}, \quad (4)$$

式中 R_F 、 R_B 分别代表薄膜前、后表面的反射系数, α 为吸收系数, l 为薄膜厚度, 通常 R_B 是可忽略的。在高光子能量区(即 $\alpha l \gg 1$), 信号趋于饱和, $S_{\text{饱和}} = C(1 - R_F)$, 这样则有

$$\frac{S}{S_{\text{饱和}}} = 1 - \exp(-\alpha l). \quad (5)$$

因此, 只要已知样品厚度 l , 就可由式(5)求出吸收系数 α 。

实验中单色仪的光源是从紫外到近红外有连续发射光谱、功率为 1kW 的高压短弧氙灯, 光源被聚焦在 0.25m 的单色狭缝上, 单色光(激励光源)被频率为 10 Hz 的斩波器调制, 聚焦后的激励光源通过一镜片分成两束, 一束由光电接收器检测光强强度, 另一束直接照射

表 1 样品几何参数与界面态密度

Table 1 Geometric parameters of samples and density of interface states.

样品编号	a-Si:H 厚度(nm)	层数	隙态密度		界面态密度 ($\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$)
			(cm^{-3})	($\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$)	
3S17	4	181	3.8×10^{17}	7.6×10^{17}	3×10^{11}
3S23	18	46	8×10^{16}	1.6×10^{17}	2.8×10^{11}
3S27	70	8	1×10^{17}	2.0×10^{17}	1.5×10^{11}
3S26	130	4	2.2×10^{16}	4.4×10^{16}	5×10^{11}
3S22	637	1	2.6×10^{16}	5.2×10^{16}	

到样品上。我们选用 CCl_4 作为浸泡固体样品的偏转介质, 因为 CCl_4 在 $0.4\sim 2.3\mu\text{m}$ 波长范围有非常弱的吸收, 并有大的 du/dT 。此外采用功率约 1mW 的 He-Ne 激光器作为光探针, 光探针紧贴且平行于样品表面, 然后由位置传感器接收。用双相锁定放大器测量其偏转信号 S 的幅度与相位, 最后通过微机得到偏转信号谱与吸收光谱。

a-Si:H/a-SiN_x:H 样品是在直立电容耦合式辉光放电反应室内制备的。a-Si:H 层及 a-SiN_x:H 层是通过交替通入反应室的 SiH₄ 气体或 NH₃:SiH₄=4 混合气体淀积而成的, 在淀积过程中不中断等离子体, 淀积衬底温度为 250°C 。样品中 a-SiN_x:H 的厚度固定为 3nm , a-Si:H 层厚度分别为 $4, 18, 70, 130\text{nm}$ 。为比较, 也选用了厚度为 637nm 单层 a-Si:H 薄膜样品, 其参数列于表 1。

三、实验结果与讨论

图 2 表示具有不同 a-Si:H 厚度的多层膜材料的吸收特性, 右下角为放大的高能区吸收特性。从图 2 可看出高能区吸收谱线形状基本相似, a-Si:H 层厚度为 4nm 的样品吸收谱有蓝移, 对此现象有两种解释, 一种认为吸收边的蓝移是量子尺寸效应^[1]的表现, 另一种观点则认为合金效应的结果, 这有待于进一步证实。在近红外亚能隙吸收区($0.8\sim 1.6\text{eV}$)明显地观察到吸收强度单调地随 a-Si:H 厚度的减小而增加。而当 a-Si:H 厚度增加时, 其吸收渐渐接近单层膜。

非晶硅材料中亚能隙的吸收往往反映了能隙中缺陷态(如悬挂键、杂质等)的吸收。缺陷态数目与吸收之间的关系如下:

$$N_s = \frac{Cnm}{2\pi^2\hbar^2} \left[\frac{(1+2n^2)^2}{e^2 f_{0j} 9n^2} \right] \int \alpha_{ex} dE, \quad (6)$$

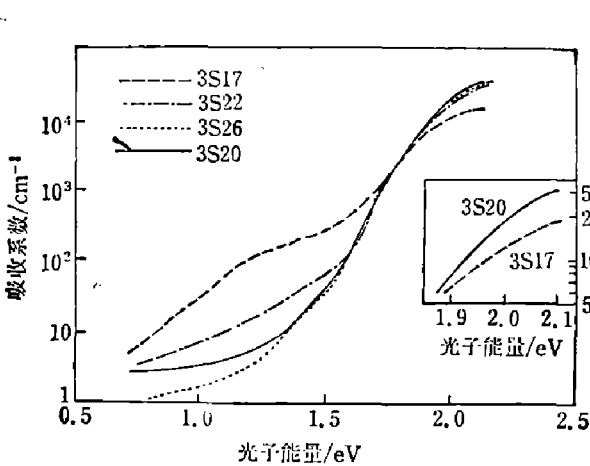


图 2 a-Si:H/a-SiN_x:H 多层膜材料的吸收谱(a-SiN_x:H 层厚度为 4nm , a-Si:H 层厚度见表 1)

Fig. 2 Absorption spectrums of a-Si:H/a-SiN_x:H multilayer films for different thicknesses of a-Si:H sublayer as shown in Table 1. The thickness of a-SiN_x:H is 4nm .

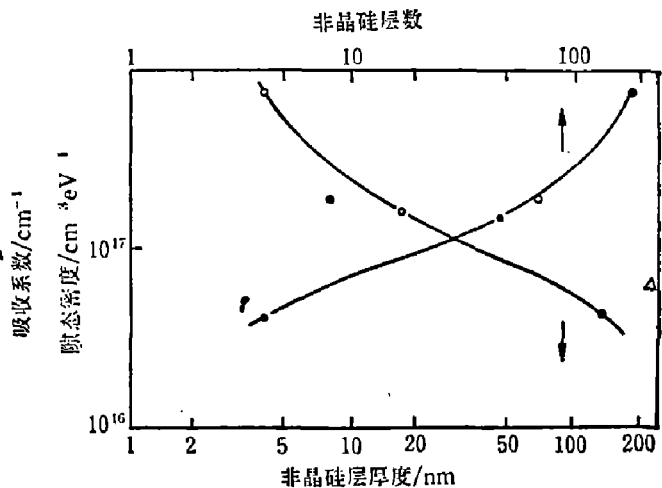


图 3 a-Si:H/a-SiN_x:H 多层膜能隙缺陷态密度与 a-Si:H 层厚度及界面数的关系

Fig. 3 Density of gap states in a-Si:H/a-SiN_x:H multilayer films vs a-Si:H sublayer thickness and number of interface.

式中 c 为光速, n 为材料折射率, m 为电子质量, e 为电子电荷, f_{0j} 为吸收跃迁的振子强度, 大括号内分式代表缺陷的有效电荷平方的倒数, α_{ex} 代表由于能隙中缺陷态吸收所增加的吸收系数, 可表示为

$$\alpha_{ex} = \alpha - \alpha_0 \exp(\hbar\omega/E_0) \quad (7)$$

式(7)中 α_0 、 E_0 分别为满足吸收边指数关系的吸收系数与斜率, α 为实际测得的吸收系数。若用 a-Si:H 的参数代入式(6), 并设 $f_{0j}=1$, 得到缺陷态密度的表达式为

$$N_s = 7.9 \times 10^{15} \int \alpha_{ex} dE \quad (8)$$

图 3 表明 a-Si:H/a-SiN_x:H 多层膜材料能隙态密度与 a-Si:H 层厚度及界面数的关系(参见表 1), 从图 3 可看出在非晶硅层很薄(如 4nm)在样品中, 缺陷态密度高达 $\sim 10^{18}/\text{cm}^3 \cdot \text{eV}$ 。图中“.”号表示缺陷态密度随 a-Si:H 层层数的变化, “o”表示缺陷态密度随 a-Si:H 层厚度的变化。从图 3 还可看出缺陷态密度随界面数的增加而增加, 因为界面数正比于 $1/(L_{\text{Si}} + L_{\text{SiN}_x})$, 这里 L_{Si} 与 L_{SiN_x} 分别为 a-Si:H 及 a-SiN_x:H 层的厚度。比较这两种结果, 可以认为: 具有薄的 a-Si:H 层的样品表现出高缺陷态密度, 主要是由于界面电子态贡献, 而不是体贡献。为此我们估算了相应的界面态密度, 列于表 1。表 1 的结果与我们用热激电导方法^[6]及 Roxlo 用电吸收方法测量的界面态密度($\sim 5 \times 10^{11}/\text{cm}^2 \text{eV}$)一致。这里还必须指出, 样品 SN27 表现出较高的缺陷态密度与我们前面的解释不吻合, 还有待于进一步的研究。

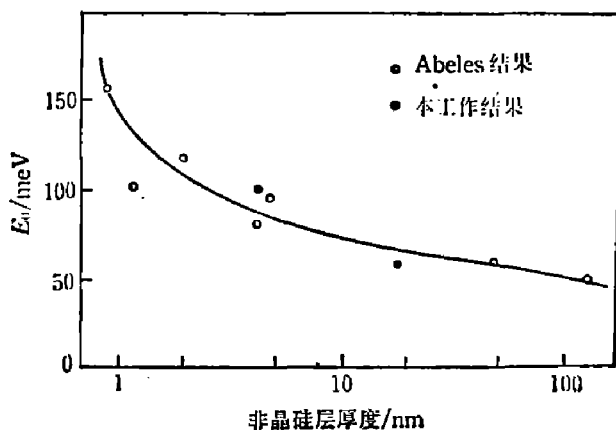


图 4 E_0 与 a-Si:H 层厚度的关系

Fig. 4 E_0 vs a-Si:H sublayer thickness.

数的差别仅在 a-Si:H 层厚度小于 4nm 时表现得非常明显。根据 Ugur 的理论结果, 我们估算了用实验测得的有效吸收系数代替 a-Si:H 的实际吸收系数计算能隙态密度所引进的误差, 在 a-Si:H 为 4nm 时引进的最大误差是使能隙态密度低 $\sim 25\%$ 。

综上所述, 用光热偏转光谱技术直接测得 a-Si:H/a-SiN_x:H 多层膜能隙态密度为 $2 \times 10^{16} \sim 4 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 。缺陷态密度与界面数目的关系表明, 高的缺陷态密度是由于界面态的影响, 界面态主要由界面上的缺陷引起。

致谢——本工作实验部分是在美国 Berkely 大学完成的, 感谢 Prof. Amer 及 Dr. Skumanich 在实验上的帮助, 感谢芝加哥大学 Prof. Fritzsche 提供的样品。

参 考 文 献

- [1] Abeles, B. and Tiedje T., *Phys. Rev. Lett.*, **51**(1983), 2003.
- [2] Amer N. M. and Jackson W. B., *Semiconductors and Semimetals*, **21**(B), Ed. by Pankove., 1985, p. 83.
- [3] Jackson W. B. and Amer. N.,M., *Phys. Rev.*, **B25**(1982), 5559.
- [4] Jackson W. B. et al., *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 256.
- [5] Brodsky M. H. et al., *Phys. Rev.*, **B16**(1977), 3556.
- [6] Zhu M. and Fritzsche H., *Phil. Mag.*, **B53**(1986), 41.
- [7] Roxlo C. B. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 1994.
- [8] Tauc J., *Amorphous and Liquid Semiconductors*, London and New York, 1974, p. 180.
- [9] Ugur H. et al., *Tetraedrally Bonded Amorphous Semiconductors*, Ed. by D. Adler and H. Fritzsche, 1985, p. 425.

DENSITY OF GAP STATES IN a-Si:H/a-SiN_x:H MULTILAYER FILMS FROM PHOTOTHERMAL DEFLECTION SPECTROSCOPY

ZHU MEIFANG

(Department of Physics, Graduate School, University of Science and Technology of China)

ABSTRACT

The optical absorption spectroscopies of a-Si:H/a-SiN_x:H multilayer films (superlattice) with different thicknesses of a-Si:H sublayer are measured using photothermal deflection spectroscopy technique. Density of gap states of multilayer film samples and its variation with a-Si:H sublayer thickness are determined from the absorption spectra. The density of interface states is approximately $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$. The error in calculating density of gap states is estimated.