

## ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ И ПРОБЛЕМЫ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

УДК 537.311.322

С.М. Манаков

Казахский национальный университет имени аль-Фараби, г. Алматы

E-mail: sergei.manakov@mail.ru

### Изучение морфологии и структурных свойств пленок $a\text{-Si:H}$ и $a\text{-SiC:H}$

**Аннотация.** Исследованы морфология и структурные свойства пленок аморфного гидрогенизированного кремния и аморфного карбида кремния. Установлено, что введение углерода в аморфную сетку кремния приводит к уменьшению среднего диаметра островков на поверхности пленок, увеличению шероховатости и к возрастанию нарушений структуры в области ближнего и среднего порядка.

**Ключевые слова:** аморфный гидрогенизированный кремний, структурные свойства, морфология поверхности, солнечные элементы.

#### Введение

Аморфный гидрогенизированный кремний ( $a\text{-Si:H}$ ) и его сплавы, включая аморфный гидрогенизированный карбид кремния ( $a\text{-SiC:H}$ ), широко используются в различных электронных приборах, таких, как тонкопленочные солнечные элементы [1], гетеропереходные солнечные элементы [2], в качестве детекторов  $\beta$ -частиц [3]. Физические свойства  $a\text{-Si:H}$  и  $a\text{-SiC:H}$  сильно зависят как от метода их осаждения, так и от технологических условий: давления, состава и чистоты исходных газов, температуры подложки, мощности разряда, конструктивных особенностей конкретной установки и ряда других факторов. Чувствительность свойств сплавов на основе аморфного кремния к примесям и условиям осаждения достаточно высока, поэтому проблема управления свойствами аморфных тетраэдрических полупроводников и проблема их воспроизводимого получения с заданными свойствами является актуальной задачей. Необходимым условием получения некристаллического материала является термодинамическая неравновесность процесса, в результате кото-

рого формируется данный материал. В соответствии с принципами теории самоорганизации (синергетики) следствием неравновесности процесса формирования материала является появление в нем неоднородностей, которые проявляются в физических свойствах самого материала и в приборных структурах на его основе. В данной работе представлены результаты исследования морфологии и структурных свойств пленок  $a\text{-Si:H}$  и  $a\text{-SiC:H}$ , полученных методом химического осаждения паров в плазме тлеющего разряда на постоянном токе в магнетроне планарного типа.

#### Экспериментальная часть

Пленки  $a\text{-Si:H}$  и  $a\text{-SiC:H}$  осаждались с использованием магнетронной системы планарного типа, работающей на постоянном токе. Такая система, в отличие от обычных емкостных схем, обеспечивает высокую степень ионизации газа, более высокие скорости осаждения пленок и работает при более низком давлении в вакуумной камере.

В качестве рабочего газа для получения

пленок a-Si:H и a-SiC:H использовались смеси: 20% силана  $\text{SiH}_4$  в гелии и 10%  $\text{SiH}_4$ , 40%  $\text{CH}_4$  в гелии, соответственно. Температура подложек в процессе роста поддерживалась постоянной –  $T=280^\circ\text{C}$ , давление в камере осаждения составляло  $P=0,2$  Па, ток разряда составлял  $I=20$  мА, напряжение  $U=400-420$  В.

Морфология пленок изучалась с помощью атомного силового микроскопа NT-MDT Ntegra Thermo. Исследование комбинационного рассеяния света производилось с использованием спектрометра NT-MDT Ntegra Spectra, при возбуждении лазером мощностью 25 мВт на длине волны 477 нм.

### Результаты и обсуждение

Исследуемые пленки имели толщину около 1 мкм. Оптическая ширина запрещенной зоны и показатель преломления составили для a-Si:H:  $E_g=1,72$  эВ,  $n_f=3,4$ ; для a-SiC:H:  $E_g=2,18$  эВ,  $n_f=2,62$ . Наличие углерода в пленке a-SiC:H сопровождается увеличением ширины запрещенной зоны и уменьшением показателя преломления.

Под морфологией пленок аморфных материалов понимают наличие в них неоднородностей

(столбов, глобул, зерен и т.д.). Характерной чертой пленок аморфных тетраэдрических полупроводников с жесткой структурной сеткой (a-Si:H и a-SiC:H) является неоднородность, которая влияет на спектры электронных состояний и свойства материала. Атомная силовая микроскопия пленок a-Si:H и a-SiC:H (рис.1) показала, что они имеют островковую структуру. Как видно из данного рисунка, размеры островков и их высота существенно различаются для пленок a-Si:H и a-SiC:H. В пленках a-SiC:H наблюдается больший разброс размеров и высоты островков по сравнению с пленками a-Si:H. Причиной этого является отличие химического состава пленок.

Энерго-дисперсионный анализ пленок аморфного карбида кремния  $\text{a-Si}_{1-x}\text{C}_x\text{:H}$  показал, что доля углерода в пленках составляет  $x=0,20$ . Таким образом, введение в аморфную матрицу относительно небольшой концентрации углерода приводит к существенному изменению морфологии поверхности пленок. Принимая во внимание островковый характер микроструктуры a-SiC:H пленки, можно предположить, что на поверхности островков происходит кластерирование атомов C в виде связей C-H<sub>n</sub>.

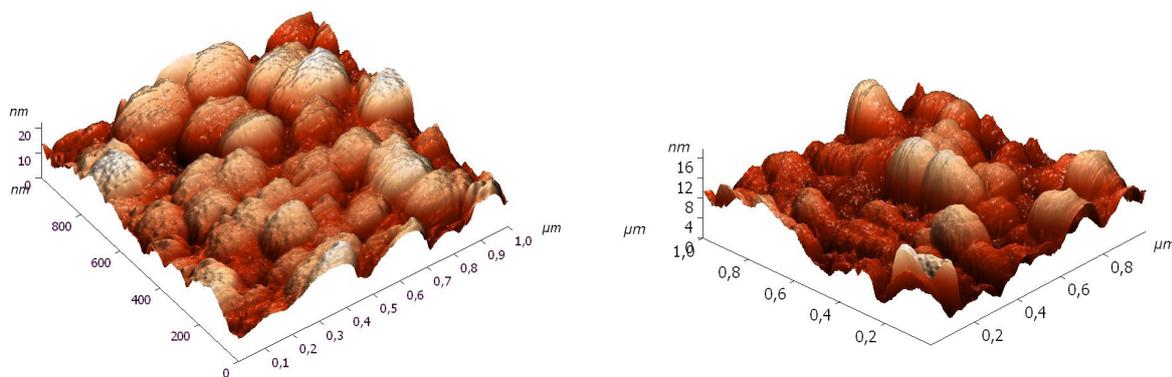


Рисунок 1 – АСМ – изображение поверхности пленок a-Si:H (а) и a-SiC:H (б)

Функция распределения высоты профиля для исследуемых пленок приведена на рис. 2. Расчет выполнялся по  $N=65536$  точкам для участков поверхности одинакового размера  $10 \times 10$  мкм.

Распределение для a-Si:H хорошо аппроксимировалось гауссовской кривой с максимумом  $H_1=16,85 \pm 0,03$  нм и полушириной  $\Delta_1=9,9 \pm 0,1$  нм. Функция распределения высоты профиля для a-SiC:H раскладывалась на две составляющие с характерными параметрами  $H_2=16,44 \pm 0,01$  нм,  $\Delta_2=10,2 \pm 0,2$  нм и  $H_3=7,44 \pm 0,02$  нм,  $\Delta_3=4,79 \pm 0,04$  нм.

Среднее значение высоты  $H_1$  и  $H_2$ , и полуширина  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  практически совпадают, следовательно можно сделать вывод, что аморфный кремний сохраняет свою морфологию при добавлении углерода (своеобразный «эффект памяти»). Кривая для a-SiC:H с параметрами  $H_3$ ,  $\Delta_3$  обусловлена вхождением углерода и, возможно, связана с образованием углеродных кластеров. Таким образом, в пленках a-SiC:H наблюдается бимодальность структуры.

Пунктирными линиями показано разложение кривых на гауссианы.

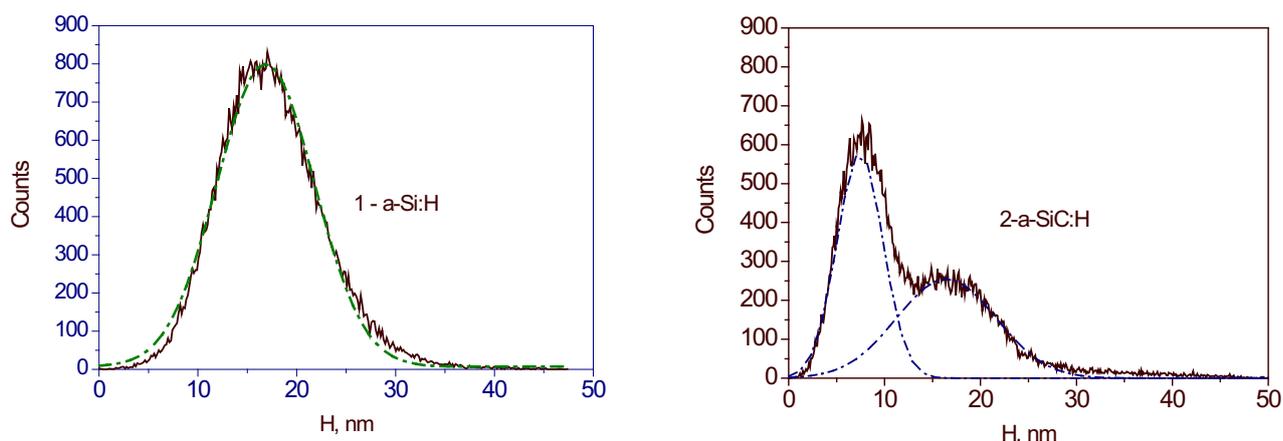


Рисунок 2 – Функция распределения высоты профиля пленок a-Si:H (1) и a-SiC:H [2]

Для математической характеристики текстуры поверхности используем среднюю квадратичную шероховатость  $S_q$ , определяемую как:

$$S_q = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (H_i - \hat{H})^2}{N}}, \quad (1)$$

где  $N$  – число измеренных точек,  $\hat{H}$  – средняя высота (нулевой уровень),  $H_i$  – высота  $i$ -й точки.

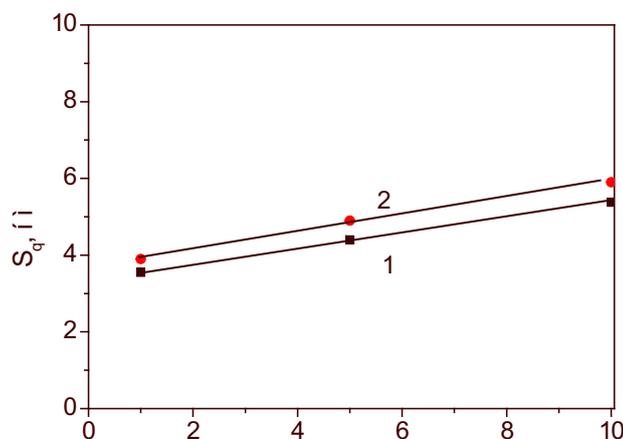


Рисунок 3 – Результаты измерения среднеквадратичной шероховатости пленок a-Si:H (1) и a-SiC:H (2)

В результате расчетов установлено, что  $S_q$  зависит от площади исследуемой области, а именно с уменьшением площади средняя квадратичная шероховатость также уменьшалась (рис. 3). Для всех сканируемых областей  $S_q$  пленок a-SiC:H превышает  $S_q$  для a-Si:H. Так для области сканирования  $1 \times 1$  мкм  $S_q = 3,55$  нм для a-Si:H и  $S_q = 3,91$  нм для a-SiC:H

Для сегментации АСМ изображений часто используют метод пороговой обработки. Пороговый метод позволяет выделить границы

объектов на заданных уровнях высоты. На рисунке 4 представлены АСМ-изображения пленок a-Si:H и a-SiC:H и соответствующие картины их обработки пороговым методом.

Установлено, что введение углерода в аморфную пленку a-Si<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>:H приводит к уменьшению среднего диаметра островков  $\bar{D}$  от 168 нм для  $x=0$  до 64 нм для  $x=0,2$ , а максимальное расстояние  $L_{\max}$  между двумя точками сечения зерна уменьшается от 259 нм до 98 нм.

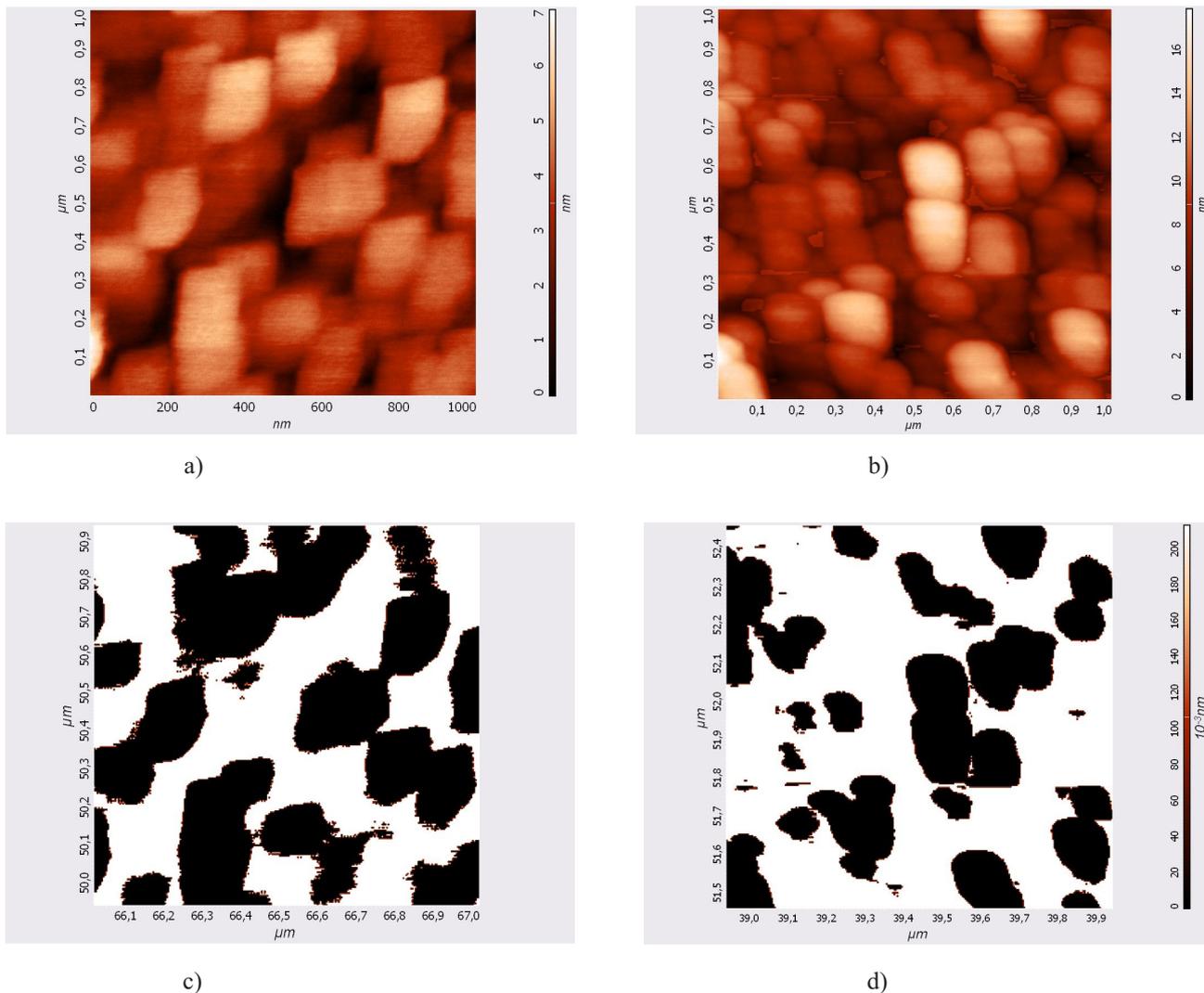


Рисунок 4 – АСМ-изображения пленок a-Si:H (а) и a-SiC:H (б) и соответствующие сечения этих изображений для обработки пороговым методом для a-Si:H (с) и a-SiC:H (д)

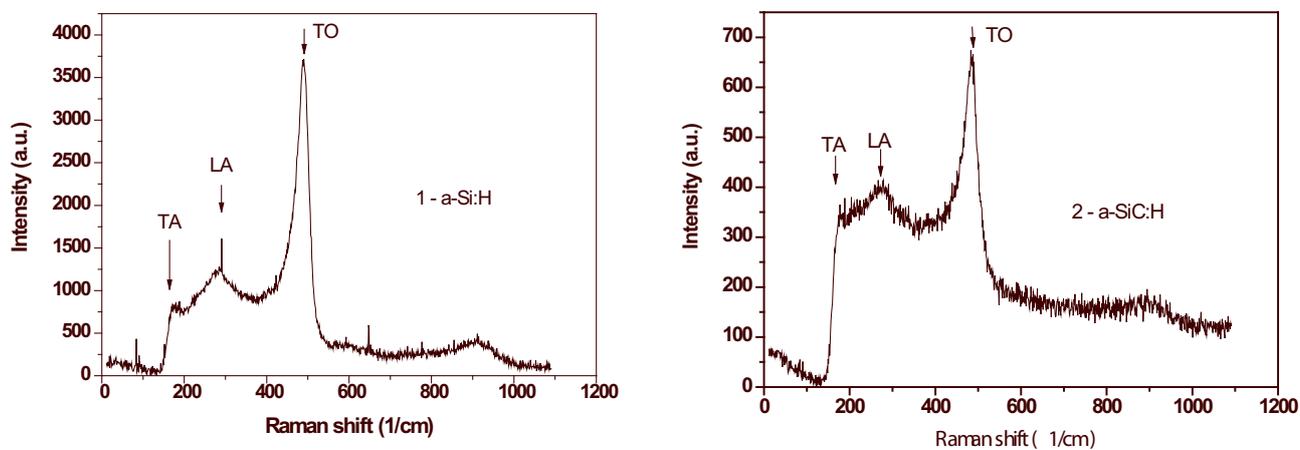


Рисунок 5 – Рамановские спектры пленок: 1 – a-Si:H, 2 – a-SiC:H

Влияние углерода на структура образцов исследовалась методом рамановской спектроскопии. На рисунке 5 представлены типичные спектры пленок a-Si:H и a-SiC:H. Отсутствие пика на  $520 \text{ см}^{-1}$  подтверждает, что a-Si:H и a-SiC:H являются полностью аморфными.

ТО - поперечные оптические моды колебаний ( $480 \text{ см}^{-1}$ ), ТА - поперечные акустические моды колебаний ( $165 \text{ см}^{-1}$ ), LA - продольные акустические колебания ( $300 \text{ см}^{-1}$ ).

Введение относительно небольшой доли углерода ( $x=0,20$ ) приводит не только к существенному увеличению оптической ширины запрещенной зоны пленок от 1,72 до 2,18 эВ, но и к возрастанию структурного беспорядка. Мерой нарушения среднего порядка служит отношение интенсивности пиков  $I_{TA}/I_{TO}$  и  $I_{LA}/I_{TO}$ . Увеличение полуширины ТО – области спектра при введении углерода и сдвиг максимума от 482 до  $475 \text{ см}^{-1}$  показывает увеличение структурных нарушений в области ближнего порядка [4]. Возрастание отношения  $I_{TA}/I_{TO}$  и  $I_{LA}/I_{TO}$  свидетельствует о нарушении структуры среднего порядка в пленках a-SiC:H по сравнению с a-Si:H [5].

### Заключение

В результате проведенных исследований установлено, что введение углерода в аморфную сетку кремния приводит к существенному изменению морфологии поверхности пленок. В пленках a-Si<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>:H наблюдается уменьшение среднего диаметра островков  $\bar{D}$  от 168 нм для  $x=0$  до 64 нм для  $x=0,2$ , а максимальное расстояние  $L_{\max}$  между двумя точками сечения зерна уменьшается от 259 нм до 98 нм.

С.М. Манаков

### а-Si:H және а-SiC:H қабықшаларының морфологиялық және құрылымдық қасиеттерін зерттеу

Босқыл сутектендірілген кремний және босқыл корбид кремний қабықшаларының морфологиялық және құрылымдық қасиеттері зерттелінген. Босқыл торға көміртекті енгізу қабықшаның бетіндегі шағын аралдардың диаметрлерінің кішіреюіне, беттегі кедір-бұдырлардың көбеюіне, сонымен қатар жақын және орта реттегі құрылымдық бұзылулардың өсуіне әкеп соқтырады.

**Түйін сөздер:** аморфтты су кремний, құрылымдық қасиеттер, беттің морфологиясы, күн элементтері.

S.M. Manakov

### A study of morphology and structural properties of a-Si:H and a-SiC:H FILMS

The morphology and structural properties of of amorphous hydrogenated silicon and amorphous silicon carbide are investigated. It is established, that carbon injection in to amorphous network of silicon result in decrease of effective diameter of islands on the films surfaces, increase of surface roughness, and in increment of structural deflections in the field of short-range and intermediate-range orders.

**Keywords:** amorphous hydrogenated silicon, structural properties, surface morphology, solar cells.

Функция распределения высоты пленок a-SiC:H раскладывается на две гауссовские кривые, одна из которых характерна для a-Si:H, а другая, по-видимому, связана с кластеризацией углерода. Бимодальность структуры пленок a-SiC:H и возможность выделить в ней характерную для a-Si:H морфологию позволяет говорить о своеобразном «эффекте памяти».

Изучение рамановских спектров показало, что введение относительно небольшой доли углерода в аморфную пленку приводит к возрастанию нарушений структуры в области ближнего и среднего порядка.

### Литература

- 1 Green M.A. Consolidation of Thin-film Photovoltaic Technology: The Coming Decade of Opportunity // Progress in Photovoltaics: Research and Applications. – 2006. – Vol. 14. – P. 383-392.
- 2 Шерченков А.А., Будагян В.Г., Мазуров А.Г. Механизмы токопереноса и свойства гетероструктур a-SiC:H/cSi // ФТП. – 2006. – Т.39(8). – С. 964-969.
- 3 Wyrsh N., Dunand S., Miazza C., et al. Thin-film silicon detectors for particle detection // Phys. Stat.Sol. C. – 2004. – Vol.1. – P. 1284-1281.
- 4 Marinov M., Zotov N. Model investigation of the Raman spectra of amorphous silicon // Phys. Rev.B. – 1997. – Vol.55. – P.2938-2944.
- 5 Wei W.S., Xu G.Y., Wang J.L., et al. Raman spectra of intrinsic and doped hydrogenated nanocrystalline silicon films // Vacuum. – 2006. – Vol.21. – P. 656-662.