

## Propiedades Ópticas de Películas Delgadas de a-Si:H Producidas por Evaporación.

Alvaro Mariño (\*)  
Hernán Sánchez (\*)  
Wilmer Ariza (\*\*)  
Departamento de Física  
Universidad Nacional de Colombia.

### Abstract.

The Reflectance and Transmittance measurements of a-Si:H thin films prepared by quick evaporation under various substrate temperature  $T_s$  and hydrogen partial pressure  $P_h$ , have been carried out.

Shift absorption edge with  $T_s$  and  $P_h$  has been studied and related to the hydrogen content and the deposition parameters.

### Resumen.

Mediciones de transmitancia y reflectancia para películas delgadas de a-Si:H depositadas por evaporación rápida bajo varias condiciones de temperaturas de sustrato  $T_s$  y presiones parciales de hidrógeno  $P_h$  se llevaron a cabo.

El corrimiento del borde de absorción tanto con  $T_s$  y  $P_h$  se estudió y correlacionó con el contenido de hidrógeno y los parámetros de deposición.

### Introducción.

El Silicio amorfo hidrogenado a-Si:H es un semiconductor cuya atracción científica y tecnológica radica en hechos como el de poseer un "gap" ajustable, tiempos de vida y longitud de difusión de portadores de carga adecuados, transiciones ópticas eficientes y la posibilidad de ser dopado n o p, lo que lo convierte en un candidato apropiado para aplicaciones fotovoltaicas<sup>1</sup>.

En este trabajo, el estudio e interpretación de las propiedades de películas delgadas de a-Si:H producidas por evaporación en presencia de  $H_2$  se realizó a partir de medidas de absorción óptica principalmente, ya que este método permite una rápida y eficaz caracterización de esta clase de materiales<sup>2</sup>.

### Método Experimental.

Las películas delgadas de a-Si:H se prepararon por evaporación rápida de silicio policristalino de grado óptico en presencia de  $H_2$  adicionado en cantidades variables, a una distancia de aproximadamente 2 cms. del evaporador de grafito con el objeto de favorecer la disociación del hidrógeno molecular y su posterior incorporación en las películas en forma atómica.

Sustratos de cuarzo y silicio cristalino fueron utilizados para medidas de absorción óptica e infrarrojo (IR) respectivamente.

Los parámetros más importantes utilizados en la preparación de las muestras de a-Si:H se resumen en la Tabla 1.

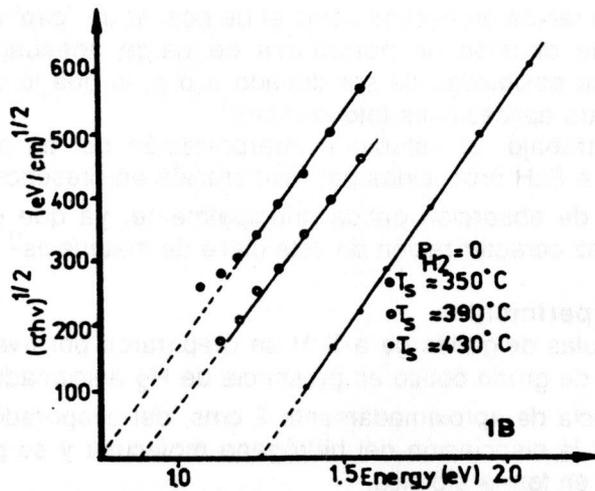
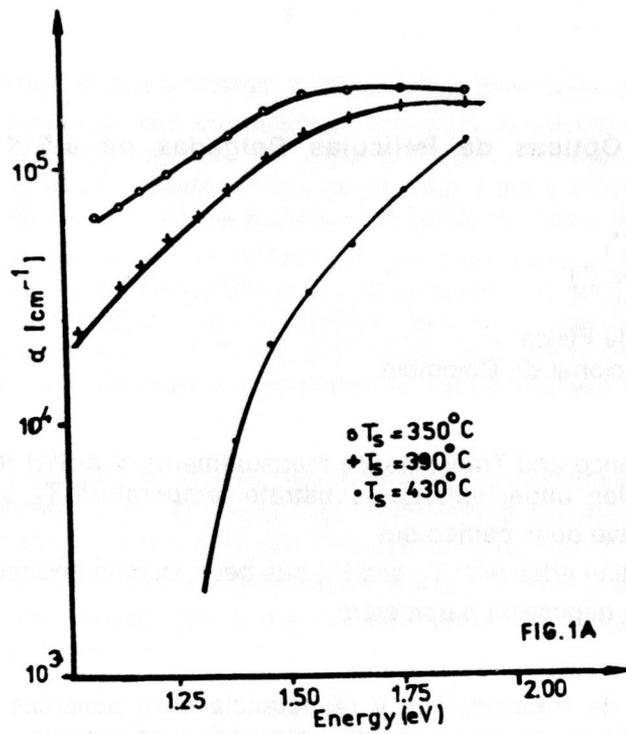


Figura 1.

1a. Coeficientes de absorción óptica en función de la energía fotónica a diferentes temperaturas de sustrato  $T_S$ .

1b. Variación del factor  $(\alpha h\nu)^{1/2}$  en función de la energía fotónica para diferentes temperaturas  $T_S$ .

Fuente	Silicio cristalino
Preparación	Evaporación rápida
Presión residual	< 10 <sup>-6</sup> Torr
Presión de Hidrógeno	0.4 - 3 mTorr
Temperatura Sustrato	300-400 C .
Rata de deposición	> 10Å/s.
Espesor películas	0.3 - 1 Mm.

TABLA 1. Parámetros de preparación de películas delgadas de a-Si:H

### Resultados.

Los coeficientes de absorción -- de las películas de a-Si:H se determinaron a partir de medidas de transmisión óptica utilizando la relación<sup>3</sup>:

$$T = (1 - R)^2 \exp(-\alpha d) \quad (1)$$

con  $d$ , el espesor de la película. La anterior expresión es válida en el caso de absorción fuerte ( $\alpha d \gg 1$ ) y en ausencia de reflexiones múltiples.

El "gap" óptico  $E_0$  se determinó a partir de la relación de Tauc<sup>4</sup>:

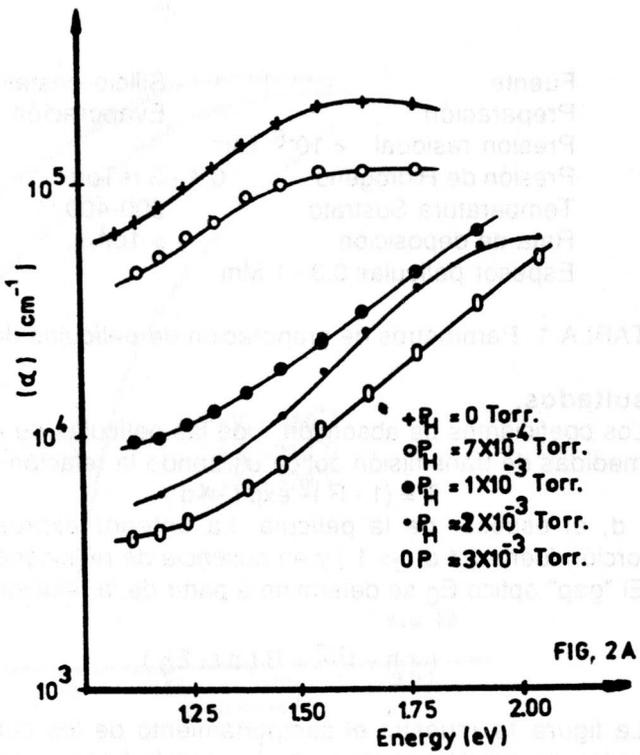
$$(\alpha h \nu)^{1/2} = B (h \nu - E_0) \quad (2)$$

La figura 1a muestra el comportamiento de los coeficientes de absorción de las películas de a-Si:H en función de la energía fotónica para diferentes temperaturas del sustrato. Un aumento de  $T_S$  produce un corrimiento del borde de absorción hacia energías mayores. En la figura 1b se presenta la variación de  $(\alpha h \nu)^{1/2}$  en función de la energía fotónica y los valores del gap óptico  $E_0$ . El aumento del gap óptico observado (0.6 - 1.25 eV.), al aumentar  $T_S$  puede correlacionarse principalmente con la reconstrucción de ligaduras no saturadas de silicio (Dangling Bonds, DB), como resultado de la mayor movilidad de los átomos de silicio. Vale la pena resaltar además, que aunque el borde de absorción presenta grandes diferencias dependiendo de las condiciones y métodos de preparación<sup>5</sup>, los pequeños valores de  $E_0$  (alrededor de 1.0 eV.) en las muestras producidas a  $T_S$  entre 300 y 400 C , pone de manifiesto la eficacia del método en la producción de a-Si "puro", es decir, con un contenido bajo de impurezas, especialmente oxígeno.

Estos resultados son compatibles con medidas de conductividad eléctrica en función de la temperatura y que muestran un mecanismo de conducción del tipo "hopping" de rango variable (HVR), característico de esta clase de muestras<sup>6,7</sup>. Por el contrario el corrimiento anormalmente grande del borde de absorción en las muestras producidas a  $T_S > 400$  C hace suponer además la presencia de impurezas como el oxígeno que también actúa como pasivador de DB.

Medidas de IR mostraron la presencia de un pico apreciable alrededor de 900  $\text{cm}^{-1}$ , el cual ha sido atribuido a la presencia de oxígeno ligado<sup>8</sup>. El oxígeno encontrado en estas películas, creemos que es producido por desorción de las paredes de la cámara.

El efecto de la adición de  $\text{H}_2$  a dos temperaturas diferentes del sustrato se presenta en las gráficas 2a , 2b y 2c. Nuevamente se observa un corrimiento del borde de absorción y el correspondiente aumento del gap óptico hasta valores cercanos a 1.3 eV., al aumentar  $P_H$ . Valores de  $P_H$  mayores que  $3 \times 10^{-3}$  Torr, además



FIG, 2 A

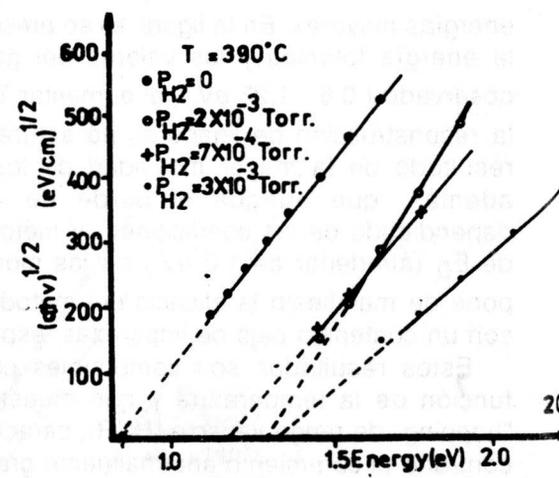
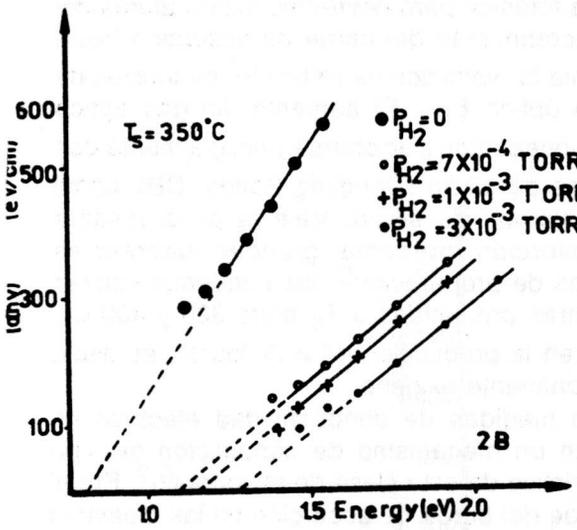


Figura 2.

2a. Coeficientes de absorción óptica para películas de a-Si: H en función de la energía fotónica para diferentes  $P_H$  y  $T_S=350C$ .

El factor  $(\alpha h \nu)^{1/2}$  en función de la energía fotónica para diferentes  $P_H$ .

2b  $T_S=350C$  y 2c.  $T_S=390C$

de dificultar la evaporación, no producen un efecto de corrimiento apreciable del borde de absorción. Este hecho, igualmente verificable por medidas de conductividad eléctrica, nos lleva a suponer que a altas presiones parciales de hidrógeno, éste se incorpora en gran parte en forma molecular ( $H_2$ ), el cual no es un eficiente pasivador de defectos DB.

La absorción en el IR debida a H y  $H_2$  es en todos los casos muy pequeña y por lo tanto no es posible cuantificar su proporción relativa, por lo cual es de suponer que el porcentaje de hidrógeno ( H y  $H_2$ ) incorporado es inferior al 1% por volumen de la muestra.

En conclusión hemos mostrado que el método de evaporación rápida en presencia de hidrógeno permite producir a-Si:H con calidades ópticas aceptables, si bien están aún por debajo de las obtenidas con otros métodos como "sputtering" reactivo y descomposición de silano, que presentan gaps ópticos típicos entre 1.6 y 1.8 eV., con concentraciones de hidrógeno hasta de 15%<sup>9</sup>. Creemos que mejores resultados pueden obtenerse mejorando la eficiencia mediante catalizadores (Pt) del método de atomización del hidrógeno molecular, lo que aumentaría en consecuencia su eficiencia como pasivador de ligaduras no saturadas de silicio.

Agradecemos especialmente al Profesor A. Ortiz por su colaboración en las mediciones I.R.

## REFERENCIAS

1. Le Comber. P.G, Madan. A and Spear. W.E. 1972, J. non-Cryst. Solids 11,219.
2. J.I. Pankove. 1984. Semiconductors and Semimetals. Vol 21. Part B. Academic Press Inc.
3. Heavens. O.S, 1975. Optical properties of thin solids films (Dover Publications N.Y.)
4. Tauc. J, Grigorocici. R, and Vancu. A, 1966. Phys. Status Solidi 15, 672.
5. Cody. G.D, 1984. Semiconductors and semimetals. Vol 21. Part B. Academic Press Inc.
6. Mell. H, 1973. Proc. 5th Int.Conf. Amorphous and Liquid Semiconductor Garmisch. Partenkirchen.
7. A. Mariño, and K. Reichelt. Rev.Colombiana de Física, Vol. 21, 1989.
8. Paesler. M.A, Anderson. D.A, Freeman. E.C, Modell. G. and Paul. W, 1978 Phys. Rev. Lett. 41, 1492.
9. Kasdan. A, and Goshorn. D.P, 1982. Appl. Phys. Lett. 42, 36.

(\*) Profesores del Departamento de Física de la Universidad Nacional de Colombia.

(\*\*) Estudiante del la carrera de Física de la Universidad Nacional de Colombia.