



INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY  
UNITED NATIONS EDUCATIONAL, SCIENTIFIC AND CULTURAL ORGANIZATION



**INTERNATIONAL CENTRE FOR THEORETICAL PHYSICS**  
34100 TRIESTE (ITALY) · P.O. B. 586 · MIRAMARE · STRADA COSTIERA 11 · TELEPHONE: 2240-1  
CABLE: CENTRATOM · TELEX 460392 - I

H4.SMR/193 - 27

"COLLOQUE INTERNATIONAL SUR LA SCIENCE DES MATERIAUX POUR L'ENERGIE".  
(26 août - 11 septembre 1986).

UNE NOUVELLE METHODE POUR L' EVALUATION  
DES CONSTANTS OPTIQUES DES COUCHES SEMICONDUCTIVES

**KANIADAKIS G.**  
Dip. di Fisica, Politecnico di Torino  
Torino, Italy

Ces notes de recherche provisoires, sont destinées aux participants. Eventuellement, d'autres copies seront disponibles au bureau 231.

UNE NOUVELLE METHODE POUR L'EVALUATION  
DES CONSTANTS OPTIQUES DES COUCHES SEMICONDUCTIVES

Kaniadakis G.

Dipartimento di Fisica, Politecnico di Torino  
Corso Duca degli Abruzzi, 24 - Torino, Italy

Resumé

On presente une nouvelle méthode qui permet, à partir des spectres de transmittance et de reflectance dans la région de l'absorption fondamentale, d'évaluer la largeur de la bande interdite  $E_g$ . De l'examen des courbes de transmittance, dans la région où l'interférence est considerable, on peut aussi bien obtenir la valeur de l'épaisseur avec des précisions de l'ordre du 2%.

Introduction

Pour avoir une rapide caracterization d'un semiconducteur amorphe, surtout quand on veut comparer differents matériaux, la connaissance de la largeur de la bande interdite peut être déjà suffisante. On presente, donc, une nouvelle technique qui permet d'évaluer la largeur de la bande interdite  $E_g$  directement à partir de l'examen des mesures de la transmittance  $T(\lambda)$  et de la reflectance  $R(\lambda)$  dans la region du spectre correspondant à l'absorption fondamentale, sans besoin de connaître les valeurs du coefficient d'absorption  $\alpha$  et de l'indice de refraction  $n$ .

La connaissance de l'épaisseur d'une couche mince déposée sur un substrat est fondamentale au bout d'évaluer ses propriétés optiques. Très souvent, en effet, la mauvaise connaissance de l'épaisseur cause des discontinuités dans les courbes de l'indice de refraction, et, comme

consequence, une fausse détermination de ses valeurs dans une large région du spectre de mesure. Etant si important la détermination la plus précise de l'épaisseur du film, on a élaboré une méthode, qui permet, à l'aide du phénomène de l'interférence, l'évaluation de l'épaisseur avec une précision bien plus élevée (<2%) que d'autres méthodes.

Energy gap

Pour déterminer  $E_g$ , la méthode qui est abituellement utilisée est l'interpolation linéaire d'une certaine fonction de l'énergie, donnée par le model théorique qui est adopté dans la description des transitions électroniques entre les bandes de conduction et de valence. La valeur  $E_g$  est donnée par le zero de la ligne droite interpolante cette fonction. Dans la littérature on trouve deux familles principales de théories; la première utilise pour construire la fonction interpolante la partie imaginaire de la constante diélectrique  $\epsilon_2$  ( $\epsilon_2^{1/2}$ ,  $(\epsilon_2 E)^{1/2}$ ,  $(\epsilon_2 E^2)^{1/2}$ , ...) et elle peut être écrite brèvement:

$$f_{T, \sigma + \tau}(\epsilon_2) = \epsilon_2^\tau E^{\sigma + \tau} \quad (1)$$

Dans la deuxième famille la fonction interpolante est tirée à partir du coefficient d'absorption ( $(\alpha/E)^{1/2}$ ,  $\alpha^{1/2}$ ,  $(\alpha E)^{1/2}$ ...), c'est à dire

$$f_{T, \sigma}(\alpha) = \alpha^\tau E^\sigma \quad (2)$$

Il faut remarquer que la fonction  $\alpha^\tau E^\sigma$  peut être obtenue à partir de la  $\epsilon_2^\tau E^{\sigma + \tau}$  si on fait l'hypothèse que l'indice optique  $n(E)$  soit constant avec l'énergie  $E$  dans l'intervall énergétique où on fait l'interpolation. Dans la région du spectre correspondante à l'absorption fondamentale la transmittance est donnée par:

$$T = (1 - R) e^{-\alpha s} \quad (3)$$

où R est la réflectance et s l'épaisseur du film.

L'introduction de la fonction  $w(R,T)$ , définie comme

$$w(R,T) = \lg \frac{1-R}{T} \quad (4)$$

qui est obtenible directement à partir des données expérimentales, nous permet d'écrire

$$\alpha = \frac{w(R,T)}{s} \quad (5)$$

D'ici suit que la fonction à interpoler, définie par la (2), peut être écrite, tout simplement, dans la forme

$$f_{\tau, \sigma}(w) = w^{\tau} E^{\sigma} \quad (6)$$

Cette relation, puisque s ne dépend pas de l'énergie, est d'importance fondamentale, vue qu'elle permet l'évaluation d' $E_g$  à partir directement de R et T, sans besoin de connaître n et k.

Au bout d'évaluer  $E_g$  dans le cadre des théories décrites par la (1), il faut observer que dans la région de l'absorption fondamentale la transmittance et la réflectance peuvent être écrites de la façon suivante:

$$T = (1-R) e^{-\frac{2\pi k E}{\hbar c} s} \quad (7)$$

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (8)$$

L'utilisation des notations

$$m_0 = \frac{1+R}{1-R} \quad (9)$$

$$k_0 = \sqrt{m_0^2 - 1} \quad (10)$$

$$s_0 = \frac{\hbar c w(R,T)}{2 k_0 E} \quad (11)$$

permet de récrire les (7) et (8) dans la forme

$$k = k_0 \frac{s_0}{s} \quad (12)$$

$$n = n_0 + k_0 \sqrt{1 - \left(\frac{s_0}{s}\right)^2} \quad (13)$$

On peut écrire la partie imaginaire de la constante diélectrique  $\epsilon_2(E)$  comme

$$\epsilon_2(E) \equiv \xi(R,T,E,s) = 2 k_0 \frac{s_0}{s} \left( n_0 + k_0 \sqrt{1 - \left(\frac{s_0}{s}\right)^2} \right) \quad (14)$$

Pour l'évaluer il faut uniquement connaître les spectres de R et de T, une fois que l'épaisseur de la couche est connue.

D'après ces considérations la (1) peut être réécrite dans la forme suivante:

$$f_{\tau, \sigma + \tau}(\xi) = \xi^{\tau} E^{\tau + \sigma} \quad (15)$$

à partir de laquelle il est possible d'évaluer  $E_g$ , une fois connues R(E), T(E), s.

Les relations (6) et (15) ont été utilisées pour l'évaluation de la largeur de la bande interdite pour différents types de matériaux (a-Si:H, a-SiC:H, a-SnC:H) et les résultats obtenus sont excellents.

#### Epaisseur et Propriétés Optiques

Pour une couche mince déposée sur un substrat, en imposant les conditions de continuité du vecteur de Poynting aux interfaces air-film et film-substrat, on peut obtenir une expression analytique, suffisamment complexe, qui donne la transmittance de la couche, en fonction de la longueur d'onde de la lumière incidente, de l'épaisseur du film, de l'indice de réfraction et du coefficient d'extinction k du matériau de la couche.

On peut donc écrire

$$T = T(\lambda, s, n, k) \quad (16)$$

Pour la plupart des semiconducteurs amorphes on peut mettre à l'évidence une région, dans le spectre de la transmittance dans le visible et le voisin infrarouge, où l'absorption est presque nulle, tandis que le phénomène de l'interférence joue son rôle.

Appelées  $\lambda_{j+1}, \lambda_j$ , les longueurs d'onde qui correspondent à deux maxima successifs du spectre de la transmittance, et  $\lambda_{j+\frac{1}{2}}$  la longueur d'onde du minimum compris entre eux, supposant que  $\lambda_{j+1} < \lambda_{j+\frac{1}{2}} < \lambda_j$  et indiquant avec  $n_{j+1}, n_{j+\frac{1}{2}}, n_j$  les valeurs des indices de refraction correspondant, on peut écrire

$$2n_j s = j \lambda_j \quad (17)$$

$$2n_{j+\frac{1}{2}} s = (j+1) \lambda_{j+\frac{1}{2}} \quad (18)$$

Avec l'hypothèse que dans la région examinée la variation de  $n$  en fonction de la longueur d'onde soit si faible, que

$$n_{j+\frac{1}{2}} \approx n_{j+\frac{1}{2}} = n_j \equiv n_m \quad (19)$$

et introduisant la notation

$$\Lambda = \frac{\lambda_j \lambda_{j+\frac{1}{2}}}{2(\lambda_j - \lambda_{j+\frac{1}{2}})} \quad (20)$$

on parvient par les (17) et (18) à:

$$n_m = \frac{\Lambda}{s} \quad (21)$$

$n_m$  est, donc, la valeur de l'indice de refraction dans la région  $\lambda_{j+\frac{1}{2}}, \lambda_j$  et qui correspond en réalité à une longueur d'onde  $\lambda_m$ . Empiriquement on a trouvé que la meilleure choix de  $\lambda_m$  est

$$\lambda_m = \frac{\Lambda}{2} \left( \lambda_{j+\frac{1}{2}} + \frac{\lambda_j + \lambda_{j+\frac{1}{2}}}{2} \right) \quad (22)$$

Etant  $T_{ex}$  la valeur expérimentale de la transmittance qui correspond à tenant compte de la (16), on peut définir la fonction

$$\Delta T_k(s) = T_{ex} - T(\lambda_m, s, \frac{\Lambda}{s}, k) \quad (23)$$

L'épaisseur du film sera, comme conséquence, tout simplement la valeur de  $s$  qui donne

$$\Delta T_k(s) = 0 \quad (24)$$

Comme on peut bien voir, dans cette relation, paraît le paramètre  $k$  (coefficient d'extinction) et dans la région de longueur d'onde dont on est en train de parler, on a des absorptances  $A$  de l'ordre de .001-.01. Pour ces valeurs de  $A$ , la position  $k=0$  dans la (23) amène à des erreurs sur l'épaisseur  $< 2\%$ , tandis que cette erreur est réduite en choisissant  $k$  entre .001 et .005 (selon la valeur de  $A$ ).

Dans l'intervalle  $0 < s < \Lambda$  (où  $\Lambda$  représente l'épaisseur d'une couche de matériel qui a  $n=1$ ) l'équation (24) n'a qu'une solution, ce qui permet l'évaluation univoque de l'épaisseur.

Une fois que l'épaisseur a été évaluée, la détermination des constantes optiques ( $n, k, \epsilon_1, \epsilon_2, \dots$ ) peut être faite.

#### References

1. F. Demichelis et al., Solar Cells, 11 (1984) 175-388
2. F. Demichelis et al., Applied Optics, 23 no 1 (1984) 165-171
3. L. Vriens and W. Riggins, Applied Optics, 23 no 24 (1983) 4105, 4110
4. G.D. Cody, Semiconductors and Semimetal Vol. 21, Part B (1984) 11, 82
5. Tauc J., Optical Properties of Solids 1972 p. 279