



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: 2340-1  
CABLE: CENTRATOM - TELEX 490892-I

H4.SMR/193 - 28

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

SUR LES PROPRIETES DU CARBURE DE SILICIUM

A. Tagliaferro

Dip. di Fisica, Politecnico di Torino  
Torino, Italy

SUR LES PROPRIETES DU CARBURE DE SILICIUM

Tagliaferro A.

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

Resumé

On a réalisé une investigation de l'effet du pourcentage en carbone sur les propriétés optoelectroniques et structurales des couches de carbure de silicium amorphe hydrogéné (a-SiC:H). On a ainsi mis à l'évidence un changement de structure au dessus d'un certain pourcentage en carbone et la considérable dépendance soit de la largeur de bande interdite que de l'indice de refraction et de la constante diélectrique de la composition de la couche.

Introduction

Dès que la première cellule solaire avec des matériaux amorphes<sup>(1)</sup> a été réalisée, les améliorations se sont suivies une d'après l'autre. Entre les plus importantes il faut citer le développement du carbure de silicium amorphe hydrogéné (a-SiC:H) comme matériau alternatif à employer: sa utilité comme constituant de la couche p, après dopage avec Boron, a été prouvée<sup>(2,3)</sup> et, actuellement, la plupart des cellules amorphes de structure pin ont une couche p en a-SiC:H:B. Gulvaric et al<sup>(4)</sup> ont clarifié que l'introduction de l'hydrogène dans l'alliage carbone-silicium réduit la densité des états dans la gap et joue son rôle aussi sur la largeur de bande interdite et sur les propriétés optiques. L'étude dont on parle ici a le but de clarifier l'effet du pourcentage en carbone soit sur la structure que sur les propriétés optoelectroniques de l'alliage a-SiC:H.

### Types de Mesures

Plusieurs types de mesures ont été faites sur les matériaux, déposés à la fois sur quartz, graphite, verre Corning et silicium cristalline.

Les mesures optiques de transmittance et reflectance ont été réalisées avec un spectrophotomètre Beckman mod UV 5240 entre les longueurs d'onde de 0.2 et 1.5 micromètres; l'élaboration de ces données<sup>(5)</sup> conduit aux valeurs de l'indice de réfraction  $n$  et du coefficient d'extinction  $k$  et, comme conséquence, à l'évaluation de la largeur de la bande interdite  $E_g$  et de la constante diélectrique, soit dans sa partie réelle  $\epsilon_1$  que dans celle imaginaire  $\epsilon_2$ .

Un spectrophotomètre Perkin Elmer 580 B a permis de réaliser les mesures d'infrarouge entre 400 et 4000  $\text{cm}^{-1}$ , au bout d'identifier les liaisons chimiques préférentielles dans les matériaux.

La composition atomique a été évaluée par moyen du Rutherford Back Scattering pour les éléments lourds, tandis que la réaction nucléaire  $^1_1\text{H}(^{15}_6\text{N}, \alpha)^{12}_6\text{C}$  a permis d'évaluer soit le pourcentage que le profil en profondeur de l'hydrogène. Mesures de résistance, qui donnent les valeurs de la résistivité et de l'énergie d'activation ont été faites, avec un mesurateur de haute résistance Hewlett Packard 4324 A, aussi bien que des mesures d'épaisseur, à l'aide d'un Dektak II "Stylus Displacement".

### Conditions de déposition et composition atomique

Le a-SiC:H est déposé par décharge lumineuse à partir d'un mélange de argon, silane et méthane. Les différents échantillons ont été déposés dans les mêmes conditions de pression totale (.4 Torr), température des substrats (250 °C), voltage appliqué et courant de décharge, la différence entre eux étant donnée par le variable rapport entre les fluxes de méthane et de silane. Dans la fig. 1 les rapports relatifs à la composition atomique  $x_c$  ( $=\%C/(\%C+\%Si)$ ),  $y_c$  ( $=\%C/\%Si$ ),  $x_H$  ( $=\%H/100$ ),  $x_O$  ( $=\%O/100$ ) sont indiqués en fonction du rapport des fluxes  $x_{atm}$  ( $=CH_4/(CH_4+SiH_4)$ ).

La présence de l'oxygène est due à une oxydation à l'air, vue que dans la chambre de déposition il y en avait pas.

### Resultats

La connaissance des valeurs de la partie imaginaire de la constante diélectrique ( $\epsilon_2$ ) nous permet de tirer des considérations sur la structure des bandes de conduction et de valence, vue que

$$\epsilon_2(E) = \text{const.} \int_{E_F}^{E_F+E} N_C(U) \cdot N_V(U-E) dU$$

où  $N_C(E)$  ( $N_V(E)$ ) est la densité des états de la bande de conduction (de valence). L'examen de la fig. 2 nous permet d'établir l'effet que le pourcentage en carbone a sur la valeur maximale de  $\epsilon_2$  ( $\epsilon_{2max}$ ) et sur l'énergie  $E_{2max}$  à laquelle elle se trouve.

Comme on peut aisément voir,  $\epsilon_{2max}$  diminue en valeur et augmente en énergie avec  $y_c$ , ce qui nous dit que les maxima des bandes s'éloignent ( $E_{\epsilon_{2max}}$  plus élevé), tandis que les bandes elles-mêmes s'aplatissent ( $\epsilon_{2max}$  plus petit). Ce résultat est consistant avec les mesures d'autres chercheurs, lesquelles montrent comment la densité des états dans la bande interdite doit augmenter très fortement avec le pourcentage en carbone. Du point de vue de la densité (voir fig.3), il faut observer qu'au début elle augmente, comme conséquence de l'entrée du carbone dans le réseau type-diamant du silicium, tandis qu'après une certaine valeur de  $y_c$  elle diminue, à cause du passage à une structure graphitique. Ce passage est témoigné aussi par le changement dans l'allure de la résistivité et de la largeur de la bande interdite qu'on peut observer surimprimé sur la fig.4 avec les figures citées auparavant.

Le changement de structure est bien évident aussi dans les mesures à l'infrarouge, vu que d'abord on observe que des liaisons Si-H, qui sont substituées, à fur et à mesure que le carbone augmente, par des liaisons Si-C et C-H, jusqu'à quand on observe que les plusieurs types de liaison C-H.

### Conclusions

On a montré qu'avec l'accroissement du pourcentage en carbone on peut observer un changement de structure, qui passe du type diamant au type graphite. Comme conséquence on peut observer que:

- (1) l'entrée de l'oxygène dans le film commence après un certain niveau de  $y_c$
- (2) la largeur de la bande interdite se bouge à partir de celle du silicium amorphe vers celle du diamant, mais, après le niveau de transition structurelle, elle retombe vers la valeur du carbon amorphe, qui est graphitique
- (3) ce niveau de transition correspond à la valeur du rapport  $x_f$  (rapport des flux) qui est abtuellement utilisé pour la production des couches p des cellules amorphes<sup>(6)</sup>. Cela semble indiquer que c'est au niveau du changement structurel qu'on trouve le plus favorable compromise entre les qualités optiques, électroniques et de acceptabilité du dopage.

### REFERENCES

- (1) D.E. Carlson, C.R. Wronsky, Appl. Phys. Lett. 28, 671 (1976)
- (2) Y. Tawada, H. Okamoto and Y. Hamakawa, Appl. Phys. Lett. 39 (1981), 237
- (3) A. Catalano, R.V. D'Aiello, J. Dresner, B. Faughan, A. Firester, J. Kane, H. Schede, Z.E. Smith, G. Swartz and A. Triano - 16th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (1982), p. 1421
- (4) A. Guivarich, J. Richard, M. Le Coontellec, E. Ligeon and J. Fontenille, J. Appl. Phys. 51, p. 2167, (1980)
- (5) F. Demichelis, E. Minetti-Mezzetti, A. Tagliaferro and E. Tréso Nuovo Cimento, 4D, n.1, 68 (1984)
- (6) Y. Kashima, S. Nonamura, K. Okamoto and Y. Hamakawa Proc. of 5th E.C. Photovoltaic Solar Energy Conference - Athens 1983

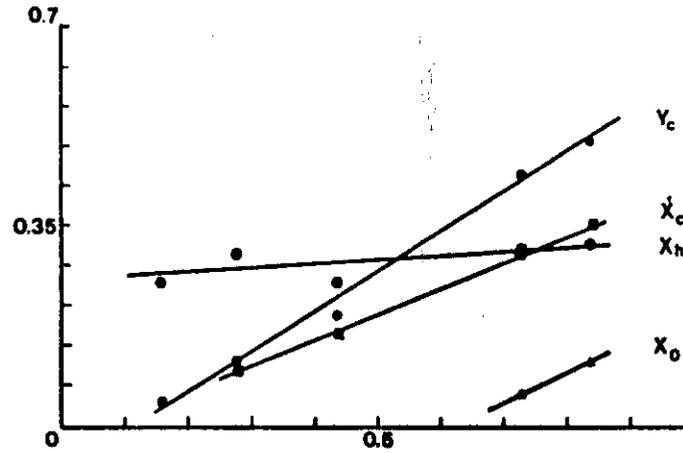


Fig.1  
Effet du rapport des fluxes sur la composition du film (voir texte)

Fig.2  
Effet de la composition sur la valeur maximale de  $\epsilon_2$  et sur l'énergie lui correspondant

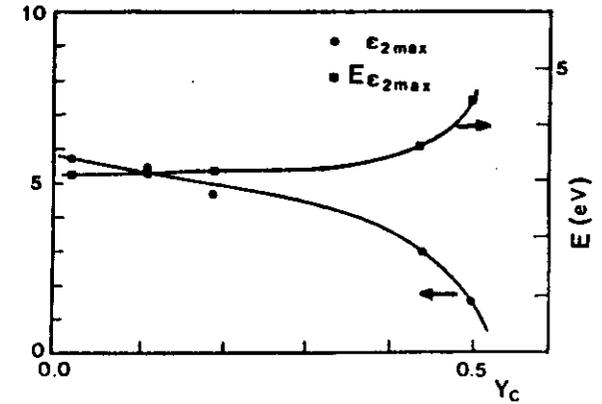
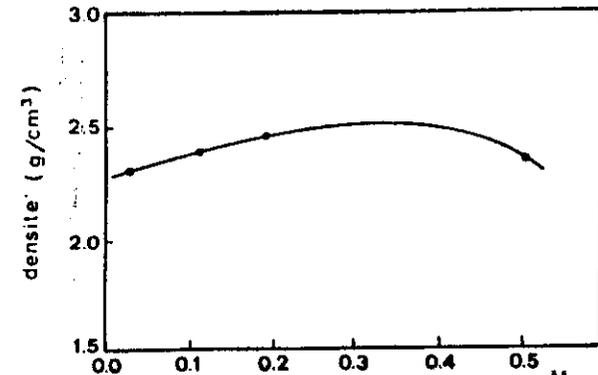


Fig.3  
Densité en fonction de la composition



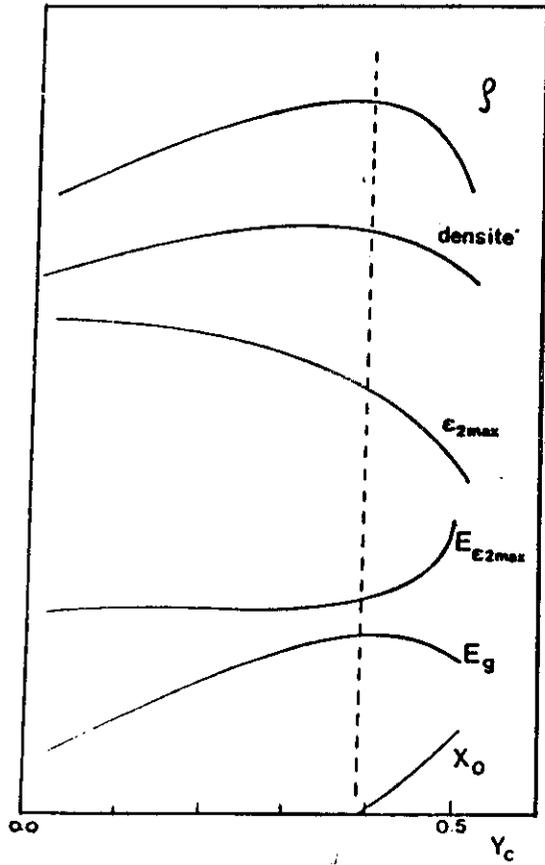


Fig.4  
 Consequences du changement de structure qui  
 a lieu à  $y_c = 0.4$