Исследование состава, структуры и оптических свойств пленок a-Si_{1-x}C $_x$: H \langle Er \rangle , легированных эрбием из комплексного соединения Er(pd)₃

© В.Х. Кудоярова [¶], В.А. Толмачев, Е.В. Гущина

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 16 апреля 2012 г. Принята к печати 25 апреля 2012 г.)

Методами резерфордовского обратного рассеяния, инфракрасной спектроскопии, эллипсометрических исследований и атомно-силовой микроскопии проведено комплексное исследование состава, структуры и оптических свойств аморфных пленок a-Si $_{1-x}C_x$: $H\langle Er \rangle$. Технология получения аморфных пленок a-Si $_{1-x}C_x$: $H\langle Er \rangle$ сочетала в себе метод высокочастотного разложения смеси газов (SiH $_4$) $_a$ + (CH $_4$) $_b$ и одновременное термическое распыление комплексного соединения $Er(pd)_3$. Показано, что увеличение CH_4 в составе газовой смеси приводит к увеличению содержания углерода в исследуемых пленках, увеличению ширины оптической зоны $E_g^{\rm opt}$ от 1.75 до 2.2 эВ. В инфракрасных спектрах наблюдались изменения состава пленок a-Si $_{1-x}C_x$: $H\langle Er \rangle$, которые, в свою очередь, сопровождались изменениями оптических констант. Проведен анализ наблюдаемых эллипсометрических спектров с использованием многопараметрических моделей. В результате проведенного анализа делается вывод о том, что хорошее совпадение экспериментальных и расчетных спектров наблюдается при учете изменяющегося состава аморфных пленок, происходящего при изменении состава газовой смеси. Существование на поверхности исследуемых пленок тонкого (6-8 нм) слоя окисла кремния и справедливость использования двухслоевой модели в расчетах эллиптических измерений подтверждаются проведенными исследованиями структуры методом атомносиловой микроскопии.

1. Введение

Интерес к исследованию аморфного карбида кремния a-Si_{1-x}C_x: H, легированного эрбием, продиктован возможностью применения электронной накачки редкоземельных ионов (РЗИ) в этих полупроводниковых материалах и создания электролюминесцентных источников света с длиной волны, используемой в фотонных системах связи. Ранее мы исследовали аморфный карбид кремния a-Si_{1-x}C_x: H, легированный Er, методом магнетронного со-распыления [1]. Этот метод наряду со многими достоинствами: простота, экологическая чистота — имеет недостаток: пленки, полученные таким методом, обладают плотностью дефектов (оборванных связей) на 2 порядка выше, чем пленки, полученные методом высокочастотного (ВЧ) разложения газов. Для приборной реализации очень важно иметь возможность легирования (бором и фосфором), а также иметь хороший транспорт носителей. Известно, что транспорт носителей (электронов и дырок) в пленках, полученных методом магнетронного распыления, был слабее, чем в пленках, полученных методом ВЧ разложения.

Осуществить легирование эрбием в условиях ВЧ разложения являлось затруднительным в силу отсутствия соответствующего Ег-содержащего газа. Представлялось интересным использовать нестандартный способ получения легированных эрбием пленок: сочетать метод ВЧ разложения газов и метод термического разложения комплексного соединения, содержащего эрбий. Ранее мы использовали такой подход при получении a-Si: $\langle Er \rangle$ [2].

5

В качестве комплексного соединения использовался $Er(thd)_3$ —tris (2,2,6,6-tetramethyl-3,5heptanedionate-Er), химическая формула которого $Er(C_{11}H_{19}O_2)_3$, а температура плавления $T=168-171^{\circ}C$.

В данной работе исследовался $a\text{-Si}_{1-x}C_x$: H, легированный эрбием из комплексного соединения $\mathrm{Er}(\mathrm{pd})_3$ — $\mathrm{tris}(2,4\text{-pentanedionate})$ -Er, химическая формула которого $\mathrm{Er}(C_5\mathrm{H}_7\mathrm{O}_2)_3$, а температура плавления $T=125^\circ\mathrm{C}$. В этом комплексном соединении температура плавления ниже и лучшее соотношение Er -C, которое, вероятно, как было показано ранее для a-Si: $\langle\mathrm{Er}\rangle$, приводит к меньшей плотности дефектов $N_D\cong 3\cdot 10^{17}\,\mathrm{cm}^{-3}$ и лучшим электронным свойствам (высокой темновой проводимости $\sigma_d\approx 3\cdot 10^{-4}\,\mathrm{C/cm}$ при $T=300\,\mathrm{K}$ и высокой фотопроводимости) [3,4].

В силу того что технология получения пленок a-Si_{1-x} $C_x\langle Er \rangle$ являлась нестандартной, было целесообразно проведение комплексного исследования состава, структуры и оптических свойств пленок a-Si_{1-x} $C_x\langle Er \rangle$, полученных методом ВЧ разложения смеси газов с одновременным термическим испарением комплексного соединения $Er(pd)_3$.

2. Методика эксперимента

Пленки были получены методом ВЧ разложения смеси газов $(SiH_4)_a + (CH_4)_b$ с одновременным термическим испарением комплексного соединения $Er(pd)_3$. Это комплексное соединение $Er(pd)_3$ —tris(2,4-pentanedionate)-Er, химическая формула которого $Er(C_5H_7O_2)_3$. Условия получения пленок были следующие: состав

353

[¶] E-mail: kudoyarova@mail.ioffe.ru

газовой смеси (т. е. содержание СН₄ в газовой смеси) изменялся от 0 до 70%, температура испарения комплексного соединения $Er(pd)_3$ составляла $105^{\circ}C$, температура подложки (c-Si) поддерживалась постоянной $T_s = 250^{\circ}C$.

Технологические условия получения a-Si $_{1-x}$ C $_x$: $H\langle Er \rangle$ были оптимизированы так, чтобы при постоянном весовом содержании комплексного соединения $Er(pd)_3$ получить увеличение оптической ширины запрещенной $(E_g^{\rm opt})$ зоны за счет увеличения содержания углерода в пленках.

Для определения состава пленок был применен ядерный микроанализ с использованием ускоренных дейтронов от электростатического ускорителя: спектроскопия обратного резерфордовского рассеяния (ОРР) и мгновенных ядерных реакций (МЯР). Элементный состав образцов был исследован методами ОРР дейтронов с энергией $E_d=0.9$ и $1.0\,\mathrm{M}$ эВ и МЯР с дейтронами при $E_d=1.0\,\mathrm{M}$ эВ (толщина поглотительного алюминиевого фильтра на детекторе $11\,\mathrm{mkm}$).

Содержание легких элементов О и С определялось методом МЯР. Более подробно эти методики приведены в работе [5]. Для определения вида связей Si-H и C-H и их концентрации использовался метод ИК спектроскопии. ИК спектры пленок a-Si $_{1-x}$ C $_x$ \langle Er \rangle снимались на спектрофотометре Фурье фирмы Bruker.

Край оптического поглощения $E_g^{\rm opt}$ (оптическая ширина запрещенной зоны) определялся из зависимости $(\alpha h \nu)^{1/2}$ от $h \nu$ (от энергии фотонов), принимая во внимание, что соответствующая зависимость описывается выражением, характерным для края Урбаха: $\alpha h \nu = B (h \nu - E_g^{\rm opt})^2 \ (E_g^{\rm opt}$ — оптическая ширина запрещенной зоны).

Исследование оптических свойств пленок (показателя преломления и толщины), а также оценка их состава проводились путем измерения пленок на спектральном эллипсометре "Спектроскан" в диапазоне длин волн 250—900 нм и путем анализа моделей гетерогенных структур [6].

Исследования структуры пленок были проведены с помощью ACM. Все исследования рельефа и свойств полученных пленок проводились с помощью атомно-силового микроскопа (ACM) SOLVER P-47 производства российской компании HT-МДТ. Для измерений использовались промышленные проводящие DCP зонды с резонансной частотой примерно 300 кГц и константой жесткости 10 Н/м, которые отличаются своей износостойкостью. Исследование проводящих свойств поверхности производилось в контактном режиме сканирования.

3. Результаты и обсуждение

3.1. Состав пленок

Как отмечалось выше, для определения содержания тяжелого элемента Er использовался метод обратного резерфордовского рассеяния (OPP) — Reserford

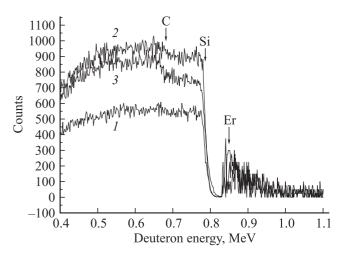


Рис. 1. Экспериментальные спектры дейтронов, рассеянных от тонких пленок a-Si $_{1-x}$ C $_x$ \langle Er \rangle в зависимости от концентрации C(x): I — 0.04, 2 — 0.14, 3 — 0.26. Энергия дейтронов $E_d = 1$ МэВ. Угол рассеяния 135°.

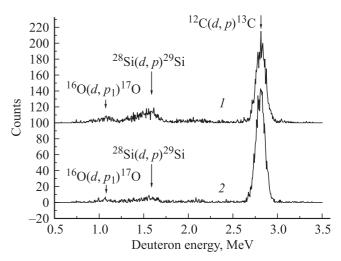


Рис. 2. Экспериментальные спектры протонов, продуктов ядерных реакций для тонких пленок $a\text{-Si}_{1-x}\mathrm{C}_x\langle \mathrm{Er}\rangle$ в зависимости от концентрации $\mathrm{C}(x)$: I — 0.04, 2 — 0.14. Энергия дейтронов $E_d=1\,\mathrm{M}$ эВ.

васкscattering (RBS). На рис. 1 приведены экспериментальные спектры дейтронов, рассеянных от тонких пленок a-Si $_{1-x}$ C $_x$ \langle Er \rangle в зависимости от концентрации [C(x)]: 1-0.04, 2-0.14, 3-0.26. Как видно из рис. 1, наблюдается рассеяние дейтронов от Er, Si и C. В качестве калибровочного образца для определения отношения Si/C использовался образец кристаллического карбида кремния c-6H-SiC, для которого отношение Si/C определено с точностью до второго знака после запятой 1.022 [7].

Экспериментальные спектры протонов, продуктов ядерных реакций для пленок a-Si_{1-x}C_x \langle Er \rangle в зависимости от концентрации C(x): 1 — 0.04, 2 — 0.14 приведены на рис. 2. В спектрах наблюдаются пики, соответствующие мгновенным ядерным реакциям 16 O(d, p_1) 17 O,

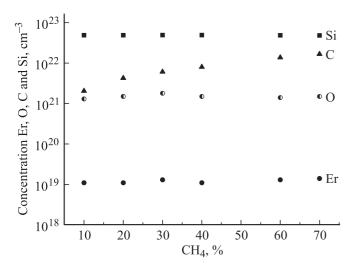


Рис. 3. Содержание Er, O, C и Si в пленках a-Si $_{1-x}$ C $_x$ \langle Er \rangle в зависимости от содержания CH $_4$ в газовой смеси.

 $^{28}{
m Si}(d,\,p)^{29}{
m Si},\,\,^{12}{
m C}(d,\,p)^{13}{
m C}.$ Площадь под этими пиками позволила определить количество кислорода и углерода в пленках. В результате проведенного исследования было показано, что увеличение СН4 в составе газовой смеси от 0 до 70% (рис. 3) приводит к увеличению содержания углерода в исследуемых пленках от $2.0\cdot 10^{21}$ до $1.6\cdot 10^{22}\,{
m cm}^{-3}$. Содержание Ег и О оставалось приблизительно постоянным $N_{\rm Er}=1.2\cdot 10^{19}\,{
m cm}^{-3}$, $N_{\rm O}=1.5\cdot 10^{21}\,{
m cm}^{-3}$.

Определить содержание в исследуемых пленках легкого элемента (водорода) методами RBS и NRR на дейтронах представляется затруднительным. Для этих целей мы использовали ИК спектроскопию.

3.2. ИК спектроскопия и край оптического поглощения

Для определения вида связи кремния с водородом (Si-H, Si-H₂), углерода с водородом (C-H)_n и оценки концентрации водорода использовалась ИК спектроскопия. По мере увеличения x от 0 до 0.26 происходят изменения в характере химического связывания атомов, входящих в состав пленок a-Si_{1-x}C $_x$: H \langle Er \rangle , которые проявляются в ИК спектрах. На рис. 4 приведены ИК спектры пропускания пленок a-Si_{1-x}C $_x$: H \langle Er \rangle для различных [С (x)]: I — 0, 2 — 0.04, 3 — 0.08, 4 — 0.11, 5 — 0.14, 6 — 0.22, 7 — 0.26. В них наблюдаются 4 основные полосы поглощения, связанные с различными модами колебаний:

- $1.~({
 m Si-H})_{
 m wag}$ мода качания связи Si-H $(630~{
 m cm}^{-1})~[8,9];$
- $2. (Si-C)_{str}$ мода растяжения связи Si-C $(770 \, \text{cm}^{-1}) \, [10];$
- 3. (Si-H_n)_{str} (n = 1, 2) мода растяжения связей Si-H и Si-H₂ (2000 и 2090 см⁻¹ соответственно) [8,11];
- 4. $(C-H)_n$ мода растяжения связи $(C-H)_n$ $(2800-3200\,\mathrm{cm}^{-1})$ [10].

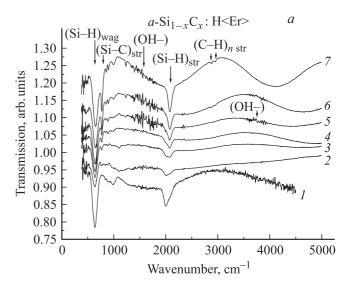
Как видно из рис. 4, в ИК спектрах также наблюдаются дополнительные полосы, связанные с CO_2 (670 см $^{-1}$) и деформационными (Si-H $_2$) $_n$ (845-890 см $^{-1}$) колебаниями. Для основных наблюдаемых полос поглощения рассчитывалось интегральное поглощение

$$I = \int [\alpha(\sigma)/\sigma] d\sigma,$$

где α — коэффициент поглощения, σ — волновое число.

В случае сложных полос поглощения, являющихся суперпозицией 2-х или нескольких линий, они были разложены на линии, имеющие форму Гаусса, определена площадь под каждой полосой.

Изменение площади под каждым из пиков в зависимости от содержания CH₄ приведено на рис. 5. Как



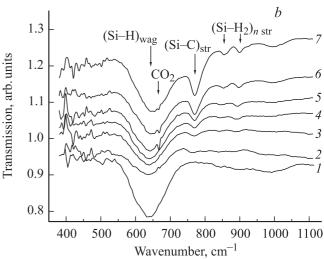


Рис. 4. a — ИК спектры пленок аморфного карбида кремния a-Si_{1-x} C_x : H \langle Er \rangle для различных [C(x)]: I — 0, 2 — 0.04, 3 — 0.08, 4 — 0.11, 5 — 0.14, 6 — 0.22, 7 — 0.26. b — ИК спектры пропускания в области 400—1100 см $^{-1}$ пленок аморфного карбида кремния a-Si_{1-x} C_x : H \langle Er \rangle для различных [C(x)]: I — 0, 2 — 0.04, 3 — 0.08, 4 — 0.11, 5 — 0.14, 6 — 0.22, 7 — 0.26.

видно из рис. 5, увеличение содержания CH_4 в газовой смеси приводит к увеличению интегрального поглощения, связанного с модами колебаний $(Si-H_2)_{str}$, $(Si-C)_{str}$, и уменьшению $(Si-H)_{str}$. Наиболее ярко это проявляется при значениях более 40%. При этих же составах газовой смеси в ИК спектрах начинает проявляться полоса поглощения, связанная с колебаниями $(C-H)_n$ — моды растяжения связи $(C-H)_n$ (2800—3200 см $^{-1}$).

Концентрация связей (Si-H) определялась путем умножения интегрального поглощения I на силу осциллятора $A_{w,s}$ соответствующего колебания: $N=A_{w,s}I$. Сила осциллятора, как правило, определяется из независимых измерений и для мод вращательных колебаний связей (Si-H) $_w$ она равна $A_w=1.6\cdot 10^{19}\,\mathrm{cm}^{-2}[11]$. Концентрация водорода, определенная по полосе поглощения (Si-H) $_w$ (630 см $^{-1}$), изменялась от 5 до 13 ат.%.

Наблюдаемые изменения в ИК спектрах свидетельствуют об изменении структуры пленок a-Si_{1-x}C_x \langle Er \rangle ,

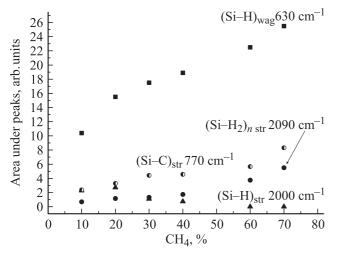


Рис. 5. Изменение площади под каждым из пиков в зависимости от содержания CH_4 в газовой смеси.

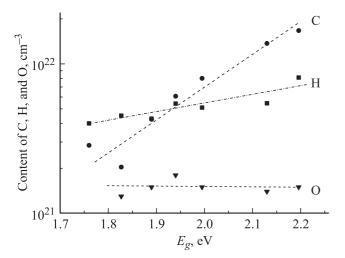


Рис. 6. Зависимости оптической ширины запрещенной зоны от содержания углерода, водорода и кислорода в пленках.

которые в свою очередь могут сопровождаться изменениями оптических констант (ширины запрещенной зоны и параметров, определяемых из эллипсометрии).

Оптическая ширина запрещенной зоны $E_g^{\rm opt}$ растет с увеличением CH₄ в газовой смеси (т.е. с увеличением содержания C) от 1.75 до 2.2 эВ, и эта зависимость может быть представлена в виде $E_g^{\rm opt}(x) = E_g^{\rm opt}(0) + 1.68x$. Наблюдается хорошее совпадение с работами [12,13].

Следует отметить, что в общем случае увеличение $E_g^{\rm opt}$ может быть связано как с увеличением числа связей Si-C, Si-O, т.е. эффектом образования нового сплава (сплавления), так и с увеличением содержания водорода, насыщающего оборванные связи Si и C. Исследования состава показали, что увеличение содержания СH4 в газовой смеси приводит к увеличению содержания С в 10 раз, а H только в 1.7 раза, концентрация О оставалась практически постоянной. Поэтому можно считать, что увеличение ширины оптической зоны $E_g^{\rm opt}$ от 1.75 до 2.2 эВ было получено за счет увеличения содержания углерода (рис. 6).

3.3. Спектральная эллипсометрия

Измерения спектров эллипсометрических углов ψ (отношение амплитуд коэффициента отражения R для p- и s-компонент (R_p/R_s)) и Δ (сдвиг фазы между ними) [6] проводились при угле падения 70° в диапазоне длин волн 250-900 нм с локальностью пучка 3 мм как на исходной пленке a-Si: $\langle Er \rangle$, так и на пленках a-Si $_{1-x}C_x$: $H\langle Er \rangle$. После измерений спектров $\psi_{\rm exp}$ и $\Delta_{\rm exp}$ проводились расчеты спектров $\psi_{\rm th}$ и $\Delta_{\rm th}$ по моделям многослойных и гетерогенных структур с помощью программного обеспечения, разработанного к эллипсометру "Спектроскан". По сходимости между расчетными и экспериментальными спектрами можно было делать выводы о правильном выборе модели и определять ее параметры.

Для исходной пленки a-Si: $\langle Er \rangle$, в первую очередь была выбрана оптическая модель изотропной пленки на изотропной подложке из монокристаллического c-Si (рис. 7,a). Оптические константы материала пленки a-Si-H приняли как константы объемного a-Si из [14], также из этого справочника были взяты оптические константы c-Si.

Неизвестным параметром в рамках этой модели была геометрическая толщина пленки. Расчетные спектры $\Delta_{\rm th}$ и $\psi_{\rm th}$, полученные варьированием толщины пленки в диапазоне от 200 до 1500 нм, сопоставлялись с экспериментальными спектрами Δ и ψ . Критериями качества подгонки спектров считались совпадение экспериментальных и расчетных спектров и минимальное значение функции ошибки в подгоночной программе. Хорошая сходимость спектров по этой модели не была достигнута, поэтому была использована вторая модель: пленка с поверхностным SiO₂-слоем небольшой толщины (рис. 7,b), который образуется естественным путем на

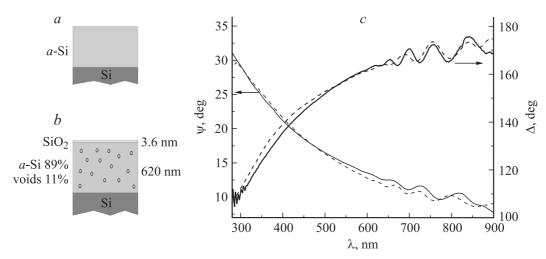


Рис. 7. Варианты использованных оптических моделей для исходной пленки a-Si: $\langle Er \rangle$ (0% CH₄): a — гомогенная пленка на подложке; b — гетерогенная двухслойная (с дополнительной поверхностной пленкой SiO₂ на границе раздела a-Si-воздух); c — наилучший подгон расчетных спектров Δ_{th} и ψ_{th} (пунктирные линии) к экспериментальным Δ_{exp} и ψ_{exp} (тонкие линии) с параметрами для модели (b). Угол падения 70°.

границе раздела пленка—воздух. Использование этой модели с показателем преломления n_{SiO_2} , взятым из справочника [14], и варьирование толщиной d_{SiO_2} в диапазоне от 0.1 до 20 нм привело к лучшей подгонке спектров, а введение в модель небольшой пористости (11%) еще улучшило сходимость спектров Δ и ψ (рис. 7, c). Для расчета по модели с пористостью эффективный показатель преломления гетерогенной пленки рассчитывался в приближении эффективной среды Бруггемана [15] с дополнительно варьируемой объемной фракцией водорода (рис. 7, b). В результате этих расчетов для исходного образца a-Si: $\langle \mathrm{Er} \rangle$ (0% CH₄) была определена оптическая модель (рис. 7, b) и получены толщина основной пленки $d_{a\text{-Si}} = 620$ нм и толщина слоя SiO₂ на границе с воздухом $d_{\mathrm{SiO}_2} = 3.6$ нм.

При исследовании пленок a-Si_{1-x}C_x: H \langle Er \rangle , полученных при изменении содержания СН4 в составе газовой смеси от 10 до 70%, исходя из результатов ИК спектроскопии, была использована оптическая модель: гетерогенная пленка состава "a-Si-SiC" с тонким поверхностным слоем SiO2. Оптические константы SiC были использованы как для объемного материала из [14]. Модель гетерогенной пленки, так же как и в предыдущем случае, рассчитывалась по приближению Бруггемана. Варьируемыми параметрами были толщины основной пленки и пленки SiO₂, а также объемная фракция SiC. Полученные расчетные спектры для образца (10% СН₄) находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными спектрами (рис. 8). На том же рисунке (на вставке) представлены параметры, найденные в результате подгона: d = 656 нм, $d_{SiO_2} = 6.4$ нм, фракция SiC — 17%. Аналогичным образом (с использованием последней модели) подгонялись параметры для последующей пленки (20% СН4). Так, для этого образца фракция SiC была увеличена до 24%.

Для образцов, полученных при содержании CH_4 30-70% в газовой смеси, использование этой модели не стало давать хорошей сходимости с экспериментальными $\Delta_{\rm exp}$ и $\psi_{\rm exp}$. Поэтому, учитывая данные ИК спектров о появлении С-Н компоненты, в рассматриваемую модель гетерогенной пленки была введена фракция a-C:H. Дисперсия показателя преломления этой пленки была взята из данных, полученных ранее [16]. В результате введения в модель гетерогенной структуры третьей компоненты была получена лучшая сходимость экспериментальных и расчетных спектров для этих образцов. В рамках этой двухслойной модели с основной гетерогенной пленкой состава "a-Si-SiC-a-C:H" были определены параметры фракций a-Si, SiC и a-C:H, которые представлены

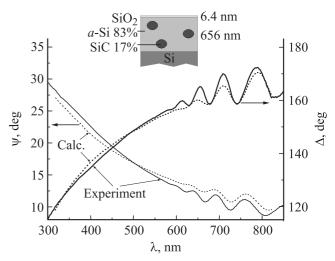


Рис. 8. Экспериментальные и расчетные эллипсометрические углы Δ и ψ , определенные в результате подгонки по двухслоевой модели гетерогенной пленки "*a*-Si-SiC" (модель и параметры на вставке) для образца a-Si_{1-x}C_x: $H\langle Er \rangle$ (10% CH_4).

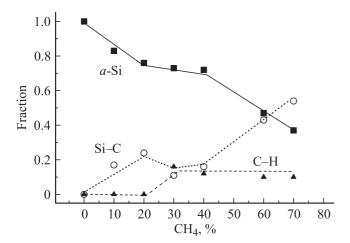


Рис. 9. Относительное содержание фракций компонентов в гетерогенной пленке $a\text{-Si}_{1-x}C_x$: $H\langle Er \rangle$ в зависимости от содержания CH_4 в газовой смеси, определенное по данным спектроэллипсометрии.

на рис. 9. Толщина основной пленки, которая также варьировалась в процессе подгонки спектров, была для образцов, полученных при содержании СН₄ в газовой смеси от 10 до 40% в диапазоне 660–672 нм, тогда как для образцов, полученных при 60 и 70% СН₄, она увеличилась до 727 и 858 нм соответственно. Толщина пленки SiO₂ для всех образцов была равна от 4 до 7 нм.

Видно из рис. 9, что по мере увеличения концентрации $\mathrm{CH_4}$ в газовой смеси фракция a-Si падает, а $\mathrm{Si\text{-}C}$ — растет. Фракция $a\text{-}\mathrm{CH}$ растет с определенного порога — 20% $\mathrm{CH_4}$ и более. Полученные из эллипсометрии параметры состава и закономерности их изменения по мере изменения технологического параметра (% $\mathrm{CH_4}$) хорошо коррелируют с данными OPP и ИК спектров.

3.4. Атомно-силовая микроскопия

Существование на поверхности исследуемых пленок тонкого (6–8 нм) слоя окисла кремния и справедливость использования двухслоевой модели в расчетах эллиптических измерений подтверждаются исследованиями структуры, проведенными с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Карты проводимости всех образцов были записаны в контактном режиме при подаче напряжения $(3-7\,\mathrm{B})$ на образец. Суть такого метода измерения заключается в том, что острие зонда непосредственно контактирует с исследуемой поверхностью. При подаче напряжения на образец между ним и проводящим зондом начинает течь ток, который и отражает особенности в проводимости структуры.

Работа в контактном режиме сканирования также подразумевает "очистку" образца от поверхностного слабо связанного загрязненного слоя, частично включая удаление окисного слоя. Согласно данным рис. 10,

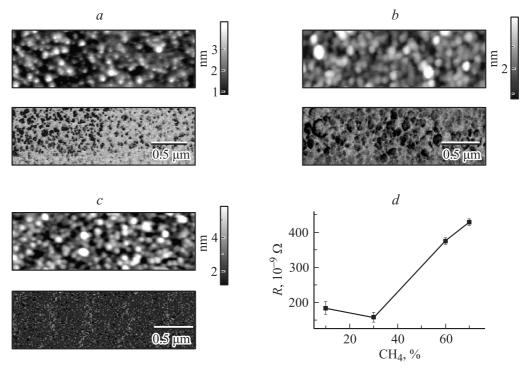


Рис. 10. Одновременно записанные АСМ топографии и карты проводимости для образцов a-Si $_{1-x}$ C $_x$: $H\langle Er \rangle$, изготовленных при различном содержании CH_4 в составе газовой смеси: a-10%-я токовая топография записана при подаче -7 В, перепад тока 0-38 рА; b-40%-я токовая топография записана при подаче -3 В, перепад тока 0-19 рА; c-70%-я токовая топография записана при подаче -6 В, перепад тока 0-14 рА; d- график изменения сопротивления образцов в зависимости от состава газовой смеси.

пленки имеют различную гранулированную структуру и особенности в токопроводящих свойствах. Из графика (рис. 10,d) видно, что по мере увеличения содержания $\mathrm{CH_4}$ в газовой смеси образцы становятся более высокоомными. Эти данные хорошо согласуются с увеличением вклада $\mathrm{Si-C}$ и $(\mathrm{Si-H_2})_n$ -связей в структуре $a\mathrm{-Si_{1-x}C_x}$: $\mathrm{H}\langle\mathrm{Er}\rangle$ пленок.

4. Заключение

Проведено комплексное исследование состава, структуры и оптических свойств аморфных пленок a-Si $_{1-x}$ C $_x$: $H\langle Er \rangle$. Технология получения аморфных пленок a-Si $_{1-x}$ C $_x$: $H\langle Er \rangle$ сочетала в себе как метод ВЧ разложения смеси газов $(SiH_4)_a + (CH_4)_b$, так и одновременное термическое распыление комплексного соединения, содержащего Er: $Er(pd)_3$.

В результате проведенного исследования было показано, что увеличение СН₄ в составе газовой смеси приводит к увеличению содержания углерода в исследуемых пленках от $2.0 \cdot 10^{21}$ до $1.6 \cdot 10^{22} \, \text{cm}^{-3}$, увеличению ширины оптической зоны $E_g^{\rm opt}$ от 1.75 до 2.2 эВ. Наблюдаемые ИК спектры свидетельствуют об изменении состава пленок a-Si_{1-x}C_x: H \langle Er \rangle , которые в свою очередь сопровождаются изменениями оптических констант. Проведен анализ наблюдаемых эллипсометрических спектров с использованием многопараметрических моделей. В результате проведенного анализа можно сделать вывод о том, что хорошее совпадение экспериментальных и расчетных спектров наблюдается при учете изменяющегося состава аморфных пленок, происходящего при изменении состава газовой смеси. Существование на поверхности исследуемых пленок тонкого (6-8 нм) слоя окисла кремния и справедливость использования двухслоевой модели в расчетах эллиптических измерений подтверждаются проведенными АСМ исследованиями.

Авторы выражают благодарность В.М. Лебедеву за измерения обратного резерфордовского рассеяния (OPP) и мгновенных ядерных реакций (МЯР).

Работа поддержана грантом президента РФ "Ведущие научные школы" HIII-3008.2012.2.

Список литературы

- E.I. Terukov, V.Kh. Kudoyarova, A.N. Kuznetsov, W. Fush, G. Weiser, H. Kuehne, J. Non-Cryst. Sol., 227-230, 488 (1998)
- [2] E.I. Terukov, O.I. Konkov, V.Kh. Kudoyarova, K.V. Koughia, G. Weiser, H. Kuhne, J.P. Kleider, C. Longeaud, R. Bruggemann, J. Non-Cryst. Sol., 266-269, 614 (2000).
- [3] A.G. Kazanskii, H. Mell, G. Weiser, E.I. Terukov. J. Non-Cryst. Sol., 299-302, 704 (2002).

- [4] H. Mell, G. Weiser, E.I. Terukov, V.Kh. Kudoyarova. Phys. Status Solidi C, 5, 1292 (2004).
- [5] G. Gavrilov, A. Krivchitch, V. Lebedev. Nucl. Instr. Meth, A515, 108 (2003).
- [6] Р. Аззам, Н. Башара. Эллипсометрия и поляризованный свет (М., Мир, 1981).
- [7] N.D. Sorokin, Yu. Tairov, V.F. Tsvetkov, M.A. Chernov. Kristalografia, 28, 910 (1993).
- [8] M.H. Brodsky, M. Cardona, J.J. Cuomo, Pys. Rev. B, **16**, 3556 (1977).
- [9] G. Lucovsky, R.J. Nemanich, J.C. Knightsl. Phys. Rev. B, 19, 2064 (1979).
- [10] Y. Katayama, T. Shimada. Jpn. J. Appl. Phys., 19, 115 (1980). Suppl. 19–2.
- [11] H. Shanks, C.J. Fang, L. Ley, M. Cordona, F.J. Demond, S. Kalbitzerl, Phys. Status Solidi B, 100, 43 (1980).
- [12] A. Skumanich, A. Frova, N.M. Amer, Sol. St. Commun, 54, 597 (1985).
- [13] D. Della Sala, P. Fiorini, A. Frova, A. Gregori, A. Skumanich, N.M. Amer. J. Non-Cryst. Sol., 77/78, 853 (1985).
- [14] Handbook of Optical Constants of Solids, ed. E.D. Palik (Academic Press Ltd., UK, 1985).
- [15] D.A.G. Bruggeman. Ann. Phys., (Leipzig), 24, 636 (1935).
- [16] V. Tolmachev, V. Ivanov-Omskii, T. Zvonareva, A. Nechitailov, V. Shvets, T. Perova, E. Krutkova. *Proc. 14th Int. Conf. on Solid Films and Surfaces* (ICSFS) (Dublin, Ireland, 2008).

Редактор Т.А. Полянская

Investigation of the composition, structure and optical properties of a-Si_{1-x}C_x: H \langle Er \rangle films, erbium-doped compounds of the complex Er(pd)₃

V.Kh. Kudoyarova, V.A. Tolmachev, E.V. Gushchina loffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences, 194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Complex study of composition, structure and optical properties of amorphous films of a-Si_{1-x}C_x:H \langle Er \rangle was performed with means of Rutherford backscattering, IR spectroscopy, ellipsometry and AFM-technology for producing amorphous films of $a-Si_{1-x}C_x:H\langle Er\rangle$ included the method of high-frequency decomposition of gas mixture of $(SiH_4)_a + (CH_4)_b$ and simultaneous thermal spraying of a complex compound Er(pd)₃. It is shown that an increase of CH₄ in the gas mixture leads to an increase in carbon content in the studied films, increasing the width of the optical zone E_g^{opt} from 1.75 to 2.2 eV. Changes in the composition of the a-Si_{1-x}C_x:H \langle Er \rangle films, which in turn were accompanied by changes in the optical constants in the IR spectra were observed. Analysis of the observed ellipsometric spectra using multivariable models was performed. The analysis concludes that a good agreement between experimental and calculated spectra is observed, taking into account the changing composition of the amorphous films, which occurs when the gas mixture composition changing. The existence of a thin (6-8 nm) layer of silicon dioxide on the film surface, and justice of 2-layer model in the calculation of ellipsometric measurements are confirmed by the AFM studies.