

PROGRAMA DE COMPUTADOR PARA EL CALCULO DEL ESPESOR Y DE LAS CONSTANTES OPTICAS DE PELICULAS DELGADAS SEMICONDUCTORAS

G. Gordillo, J. A. Rodríguez, R. Cardona y P. Infante
Departamento de Física, U. Nacional, Bogotá

RESUMEN

Utilizando un sencillo modelo físico propuesto por Swanepoel en 1983 sobre la transmisión de la luz en películas delgadas se escribió un programa de computador para el cálculo del espesor y de las constantes ópticas de películas delgadas. El programa fue aplicado al análisis de la transmisión en películas delgadas de CdS.

1. INTRODUCCION

En la tecnología actual de celdas solares, fotodetectores y en otros sectores de la electrónica y microelectrónica se está recurriendo cada día más al desarrollo de dispositivos con base en películas delgadas debido a la considerable disminución de costos en comparación con dispositivos fabricados con otras tecnologías [1]. Por consiguiente, se hace necesario un estricto conocimiento de las propiedades tanto eléctricas como ópticas de las películas delgadas semiconductoras.

Para la determinación de las constantes ópticas de películas delgadas semiconductoras y del espesor, usualmente se recurre a la medida del coeficiente de reflexión (R) y de la transmisión (T) en función de la longitud de onda de la luz (λ) y luego a partir de estos resultados por medio de programas de computador se encuentran el índice de refracción n y el coeficiente de absorción α . Tal método ha sido tratado por varios autores [2-7], y presenta dos aspectos que pueden hacer lenta y susceptible de error la determinación tanto de n como de α . El primer aspecto se refiere a la medida en sí, ya que la medición de la reflexión necesita sumo cuidado y el uso de espejos esféricos especiales para captar la parte difusa de la reflexión. El segundo aspecto se refiere al tratamiento de los datos, ya que se hace necesario el uso de algoritmos y métodos numéricos especiales que lleven a una solución única de las ecuaciones de T y R.

En el presente trabajo exponemos un modelo físico muy sencillo, propuesto por Swanepoel [8] que en los últimos años se ha empleado con muy buenos resultados para el análisis de los datos de transmisión T versus longitud de onda λ , para incidencia normal de la luz, y de allí encontrar n , α y el espesor d de películas delgadas de diferentes materiales. Para llevar a cabo tal cálculo se desarrolló un programa de computador escrito en lenguaje Pascal, el cual nos permite saber el espesor y las constantes ópticas de películas delgadas; el programa también nos proporciona las gráficas del índice de refracción y del coeficiente de absorción en función de la longitud de onda λ .

También se presentan curvas típicas de índice de refracción y del coeficiente de absorción en

función de longitud de películas delgadas de CdS y (ZnCd)S que fueron calculadas usando el programa de computador descrito .

2. MODELO FISICO

El modelo en el cual se basa el cálculo de la transmisión consiste en una película delgada semiconductor de espesor d adherida a un sustrato transparente; en la figura 1 vemos un esquema de dicha estructura.

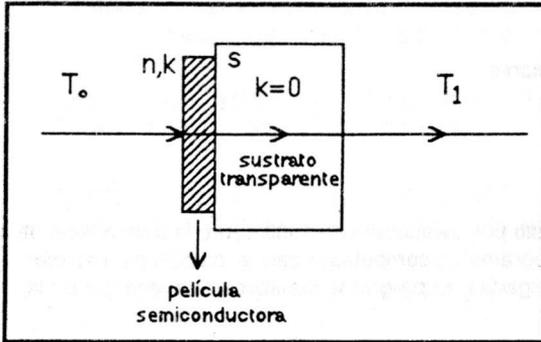


Figura 1. Modelo físico para el cálculo de la transmisión en función de la longitud de onda para películas delgadas semiconductoras depositadas sobre un sustrato transparente.

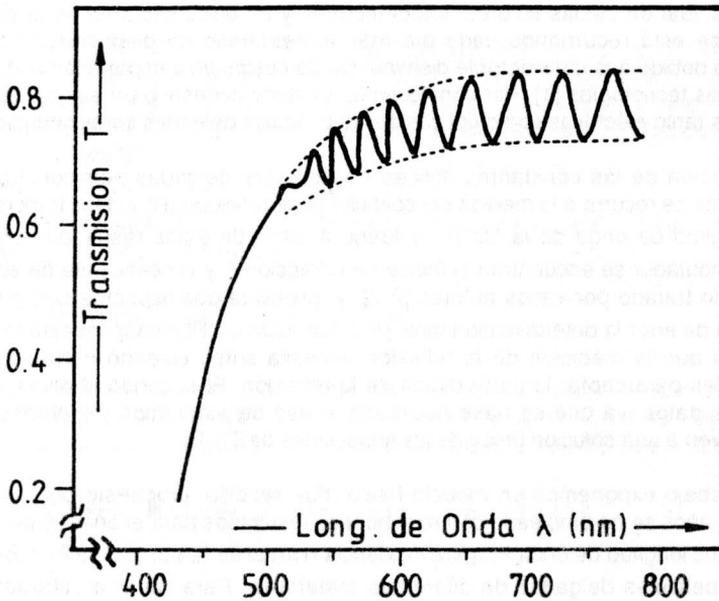


Figura 2. Espectro típico de transmisión en función de la longitud de onda de la luz, para una película delgada de CdS depositada por evaporación en alto vacío sobre un sustrato de vidrio. Sobre el espectro original se han punteado las curvas correspondientes a T_M , y a T_m .

Para películas delgadas semiconductoras de espesor homogéneo y cuya superficie no presenta irregularidades, se ha encontrado que el espectro de transmisión (T) en función de la longitud de onda de la luz (λ) tiene la forma dada en la figura 2. Los resultados que se reportan son válidos para espesores entre 500 nm y 5 μ m. La limitación se debe fundamentalmente al espectrofotómetro utilizado y a que las franjas de interferencia se hacen muy pequeñas impidiendo obtener resultados confiables.

El espectro de transmisión mostrado depende de la longitud de onda, λ , del índice de refracción de la película semiconductor, n , del coeficiente de absorción α , del espesor d y del índice de refracción del sustrato s ; para un amplio rango de longitudes de onda del espectro de la figura 2, la transmitancia (T) está dada, con muy buena aproximación, por las ecuaciones [8]:

$$T = \frac{Ax}{B - Cx \cos \varphi + Dx^2} \quad (1)$$

$$A = 16 n^2 s$$

$$B = (n+1)^3 (n+s^2)$$

$$C = 2(n^2-1)(n^2-s^2)$$

$$D = (n-1)^3 (n-s^2)$$

$$\varphi = \frac{4\pi n d}{\lambda}$$

$$x = e^{-\alpha d}$$

En el modelo propuesto por Swanepoel [8] se consideran las envolventes de los máximos de transmisión T_M y la de los mínimos T_m como funciones continuas de λ . Las expresiones para dichas envolventes son:

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (2)$$

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad (3)$$

A partir de aquí se consideran tres regiones para el análisis de la curva de transmisión y en cada una de ellas se determinan n y α .

Vamos a examinar cada una de estas regiones:

a) Región transparente

La región transparente es aquella región del espectro de transmisión en función de λ donde los máximos de transmisión de la película T_M coinciden con el valor de la transmisión del sustrato T_S (Ver la figura 2).

En esta región se considera la película muy débilmente absorbente y por lo tanto se puede suponer que $\alpha=0$ ó equivalentemente $x=1$. Entonces, con el uso de esta aproximación en las ecuaciones planteadas anteriormente se obtiene que:

$$T_M = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (4)$$

de donde se puede determinar el índice de refracción del sustrato s .

Por lo tanto es posible obtener s a partir de medidas de transmisión del sustrato solo o utilizando la parte de alta transmisión del espectro del sistema sustrato/película. Si la transmisión del vidrio es casi una constante en el rango de λ que presenta interés, puede usarse un índice de refracción s constante tomando un promedio.

Una vez determinado s por alguna de las alternativas mencionadas anteriormente, se puede determinar n a partir de datos de T_m así:

$$T_m = \frac{4 n^2 s}{n^4 + n^2(s^2 + 1) + s^2} \quad (5)$$

Es conveniente recordar que T_m se ha tomado como una *función continua* de la longitud de onda λ y que por lo tanto se pueden tomar valores sobre la línea punteada en la figura 2 que no aparezcan en el espectro original.

b) Región de absorción débil y media

Una vez que los máximos de transmisión T_M comienzan a ser menores que la transmisión del sustrato T_s entramos en la región de absorción débil y de absorción media.

En esta región puede eliminarse x restando los inversos de los máximos y de los mínimos de transmisión dados por las ecuaciones (2) y (3); realizando esto se obtiene:

$$n = [N + (N^2 - s^2)^{\frac{1}{2}}]^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

siendo:

$$N = 2s \frac{T_M - T_m}{T_M T_m} + \frac{s^2 + 1}{2}$$

con lo cual se obtiene el índice de refracción; una vez conocido n se continúa con la determinación de x así:

$$x = \frac{E_M - [E_M^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4)]^{\frac{1}{2}}}{(n - 1)^3 (n - s^2)} \quad (7)$$

siendo:

$$E_M = \frac{8 n^2 s}{T_M} + (n^2 - 1)(n^2 - s^2)$$

Existe otra forma alternativa de determinar x usando los mínimos de la transmisión, pero no fue usada en el programa de computador.

c) Región de fuerte absorción

En esta región desaparecen las franjas de interferencia, y las curvas T_M y T_m se unen formando una sola curva que llamaremos T_0 . Los índices de refracción n conocidos anteriormente se ajustan según

$$n = \frac{G}{\lambda^2} + n_0 \quad (8)$$

y se extrapolan a esta región. En la expresión inmediatamente anterior, G es prácticamente una constante. Dependiendo del material de las películas delgadas pueden usarse otras leyes para el ajuste; en algunos materiales es conveniente considerar adicionalmente un término proporcional a λ^{-1} . Hecho esto puede calcularse x según:

$$x = \frac{(n+1)^3(n+s^2)}{16n^2s} T_0 \quad (9)$$

En cada una de las regiones anteriores, el coeficiente de absorción α se calcula a partir de x usando $\alpha = e^{-\alpha d}$ tal como se definió en el bloque de ecuaciones (1).

Determinación del espesor de la película delgada

Las oscilaciones que presenta la curva de transmisión de la figura 2 se deben a la interferencia entre la luz reflejada por la superficie de la película y la reflejada en la interfaz película-sustrato. Para estas franjas de interferencia es válido que:

$$2nd = \pi \lambda \quad (10)$$

Aplicando lo anterior a dos máximos o dos mínimos adyacentes se tiene que:

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2(\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1)} \quad (11)$$

de donde se obtienen valores para el espesor d , los cuales pueden promediarse entre sí; sin embargo, en el programa de computador se optó por aplicar un método gráfico sugerido por la ecuación:

$$2nd = \left(\pi_1 + \frac{\ell}{2}\right) \lambda \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (12)$$

$$\frac{\ell}{2} = 2d \left(\frac{n}{\lambda}\right) - \pi_1$$

donde π_1 es el número de orden (entero o semientero) del primer extremo de la transmisión; el método consiste en graficar $\ell/2$ en función de n/λ y realizar un ajuste por mínimos cuadrados y de allí hallar d a partir de la pendiente

Alternativamente con estos nuevos valores de d pueden rectificarse los valores de n usando la ecuación de la interferencia (10):

3. EL PROGRAMA DE COMPUTADOR

La figura 3 muestra el diagrama de bloques del programa de computador escrito para calcular n , α y d a partir de los datos de transmisión en función de la longitud de onda.

El programa se escribió en lenguaje Turbo Pascal versión 5.5 a él se le deben dar los datos tanto de los máximos como de los mínimos de transmisión así como sus longitudes de onda. Adicionalmente deben dársele los datos de transmisión para la región de fuerte absorción (T_0).

Los datos de transmisión son corregidos para tener en cuenta el ancho de banda de la línea espectral del monocromador usado. En el caso de la curva de la figura 2, los valores se corrigieron con un ancho de banda igual a 4nm; dicho valor se calcula como la dispersión lineal de la rejilla de difracción multiplicada por el ancho de la ventana de salida de la luz.

Una vez corregidos los datos se procede a calcular tal como se indica en el diagrama de la figura 3.

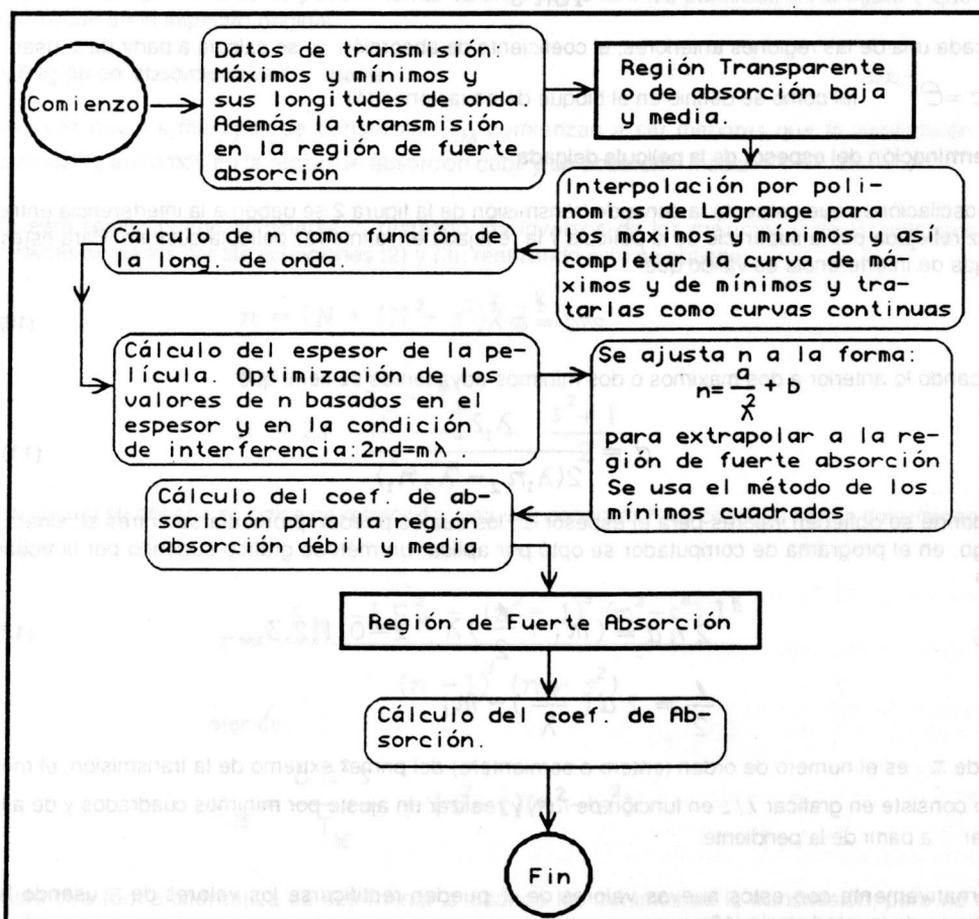


Figura 3. Diagrama de bloques del programa que calcula n , α y d a partir de datos de transmitancia.

4. RESULTADOS

Usando un montaje experimental cuyo diagrama mostramos en la figura 4, se midió la transmisión de películas delgadas de CdS fabricadas por evaporación en alto vacío.

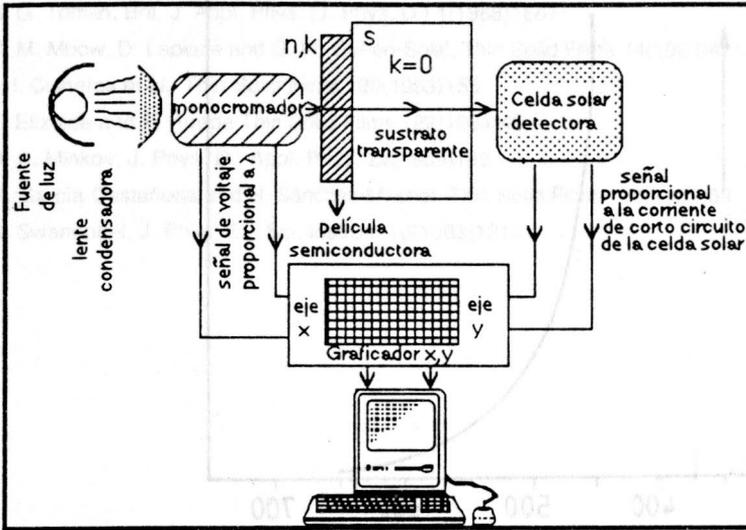


Figura 4. Diagrama del aparato usado para la medición de la transmisión en función de la longitud de onda para películas delgadas de CdS.

En la figura 2 ya hemos mostrado una típica curva de transmisión tomada. Una vez que se tiene esta curva se dan los datos al computador y éste realiza los cálculos. Como resultado de ello se tienen las gráficas de índice de refracción (n) y del coeficiente de absorción (α) en función de la longitud de

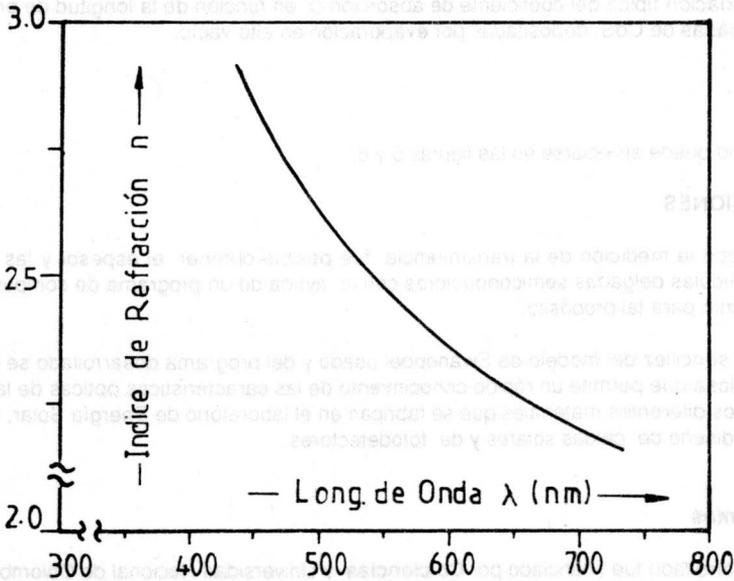


Figura 5. Variación típica de n en función de λ para películas delgadas de CdS.

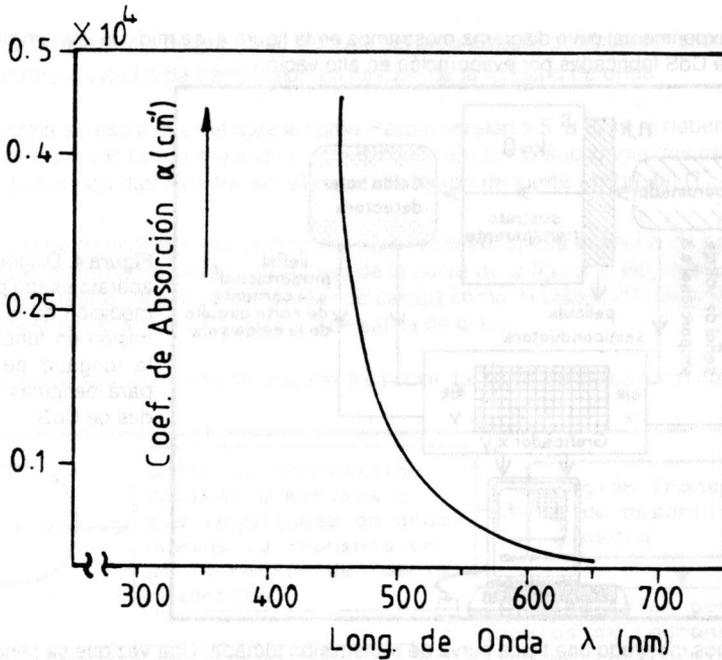


Figura 6. Variación típica del coeficiente de absorción α en función de la longitud de onda λ para películas delgadas de CdS, depositadas por evaporación en alto vacío.

onda (λ), como puede apreciarse en las figuras 5 y 6.

5. CONCLUSIONES

Únicamente con la medición de la transmitancia fue posible obtener el espesor y las constantes ópticas de películas delgadas semiconductoras con la ayuda de un programa de computador especialmente escrito para tal propósito.

A pesar de la sencillez del modelo de Swanepoel usado y del programa desarrollado se obtuvo información valiosa que permite un rápido conocimiento de las características ópticas de las películas delgadas de los diferentes materiales que se fabrican en el laboratorio de Energía Solar, lo cual a su vez facilita el diseño de celdas solares y de fotodetectores.

Reconocimientos

El trabajo desarrollado fue financiado por **Colciencias** y Universidad Nacional de Colombia por intermedio del **CINDEC**.

BIBLIOGRAFIA

- [1] A. L. Fahrenbruch and R. Bube, "Fundamental of Solar Cells", Academic Press, 1983, Cap. 9.
- [2] S. G. Tomlin, Brit. J. Appl. Phys. (J. Phys. D.) 1(1968)1667.
- [3] C. M. Mbow, D. Laplaze and G. W. Cohen-Solal, Thin Solid Films 74(1980)43.
- [4] J. I. Cisneros et al., Thin Solid Films 100(1983)155.
- [5] E. Elizalde and F. Rueda Thin Solid Films 122(1984)45.
- [6] D. A. Minkov, J. Phys. D.: Appl. Phys. 22(1989)199.
- [7] M. García-Castañeda and H. Sánchez-Machet, Thin Solid Films 176(1989)69.
- [8] R. Swanepoel, J. Phys. E. : Sci. Instrum 16(1983)1214.

Guillermo Franco A.

Departamento de Física

Universidad Nacional de Córdoba, Argentina 5000 Córdoba

RESUMEN

Se ha estudiado el efecto de la temperatura sobre la conductividad eléctrica y la resistencia de contacto de las uniones p-n de silicio de tipo p-n. Los resultados muestran que la conductividad eléctrica y la resistencia de contacto de las uniones p-n de silicio de tipo p-n aumentan con la temperatura.

ABSTRACT

We have found experimental data for the temperature dependence of the electrical conductivity and the contact resistance of p-n junctions of silicon. The results show that the electrical conductivity and the contact resistance of the p-n junctions of silicon increase with temperature.

INTRODUCTION

During the last two years we have carried out a study to improve the