

傅里叶变换红外光谱仪测定太阳能薄膜中氢含量和 R 因子

FTIR-026

摘要：傅里叶变换红外光谱分析在半导体行业及其晶体材料结构、成分分析和杂质缺陷特性研究等方面起到了较大的作用。本文以实际测定为例，介绍了使用岛津 IRAffinity-1 和衰减全反射附件测定玻璃镀膜 (a-Si: H) 的红外光谱图，计算其薄膜中的氢含量，然后利用岛津分峰软件进行分峰后，计算 R 因子。

关键词：傅里叶变换红外光谱仪 a-Si: H 薄膜 分峰软件 氢含量 R 因子

硅系列太阳能电池中，单晶硅太阳能电池转换效率最高，但是由于单晶硅的价格高，为寻找单晶硅电池的替代产品，多晶硅薄膜太阳能电池和非晶硅薄膜太阳能电池。对多晶硅，考虑在硅表面与空气之间插一层折射率适中的透光介质膜，以降低表面的反射，在工业化应用中，SiN_x 膜被选择作为硅表面的减反射膜，SiN_x 膜的折射率随着 x 值的不同，可以从 1.9 变到 2.3 左右，这样比较适合于在 3.8 的硅和 1.0 的空气中进行可见光的减反射设计，是一种较为优良的减反射膜。SiN_x 膜被制备在硅的表面起到两个最用，其一是减少表面对可见光的反射；其二，表面钝化作用。a-Si: H 薄膜的物理性质很大程度上依赖于样品中氢的含量与 Si: H 键的位型，传统的化学气相沉积法，由于薄膜生长温度较高，因此膜中氢的含量过低，导致膜中存在大量缺陷。激光化学气象沉积能在低于 400℃ 的沉底温度下生长 a-Si: H，从而使膜中含有适量的氢，可获得较高质量的薄膜。除了通过氢含量判断薄膜的质量好坏之外，R- 因子也可反映薄膜的质量，R 因子定义是 2000 cm⁻¹ 处的硅氢峰 I 的面积和 2100 cm⁻¹ 处硅氢峰 II 面积的比值。增加 2000 cm⁻¹ 处的硅氢峰 Si-H₂，R 因子值会降低，薄膜质量增加。即 R 因子越小，薄膜质量越好。

本文利用岛津 IRAffinity-1 和衰减全反射附件测定硅片镀膜 (a-Si: H) 的红外光谱图，根据公式计算薄膜中氢含量。然后利用岛津分峰软件进行分峰后，计算其 R 因子。

实验部分

1.1 原理

薄膜沉积在单晶硅衬底上，厚度约为 0.5 μm，当衬底温度为 200℃ 时，样品的红外吸收谱在 2090 cm⁻¹ 处有一吸收峰，同时在 845 cm⁻¹ 和 890 cm⁻¹ 处各有一吸收峰，这三个峰通常认为是 SiH₂ 和 SiH_{2n} 的吸收，而同样条件下，辉光放电生长的样品，红外吸收峰在 2000 cm⁻¹ 附近，这是由 SiH 的吸收引起的。用 PECVD 法制备的 a-Si: H 膜中含有大量的氢，Si: H 膜中的氢以 Si-H、N-H 键的形式存在于薄膜中，在常温下，它们分别在 2180 cm⁻¹ (Si-H) 和 3370 cm⁻¹ (N-H) 附近存在着吸收带，该吸收带积分面积与含量具有对应关系，通常以下公式计算 Si₃H₄ 中的氢含量：

$$N_H = \frac{1.9 \times 10^{17} S_{N-H} + 1.4 \times 10^{17} S_{Si-H}}{d}$$

其中 N_H：膜中氢含量（原子数/cm³）；

S_{N-H}：N-H 带积分面积（cm⁻²）； S_{Si-H}：Si-H 带积分面积（cm⁻²）； d- 样品厚（cm）

利用分峰软件，对 Si-H 峰（2000~2100cm⁻¹）进行高斯分峰处理，将 2000cm⁻¹ 定义为 Si-H1，积分面积为 I_{Si-H1}，将 2100cm⁻¹ 定义为 Si-H2，积分面积为 I_{Si-H2}，根据方程式 R(%)=100 × I_{Si-H2}/(I_{Si-H1}+I_{Si-H2})，计算 R 因子。

1.2 仪器及测定条件

仪器：Shimadzu IRAffinity-1

分辨率：4 cm⁻¹

软件：IRSolution；分峰软件

扫描次数：20

附件：衰减全反射附件

切趾函数：Happ-Genzel

波长范围：4000 ~ 700 cm⁻¹

1.3 测定应用实例

本文对镀膜厚度为 300 nm 镀膜玻璃进行红外测试。

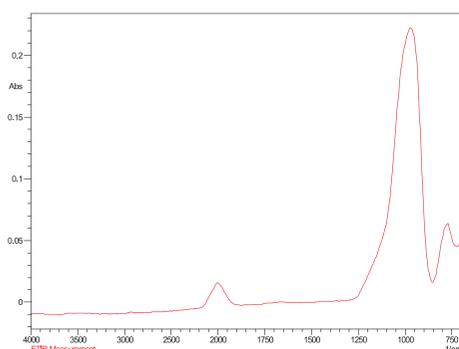


图 1 样品红外光谱图

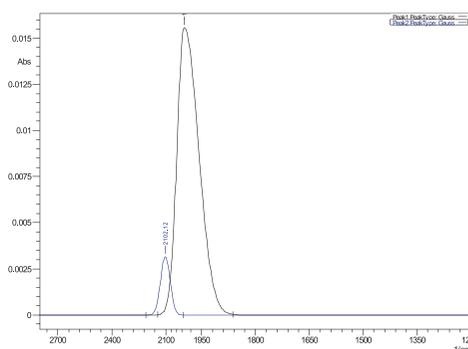


图 2 样品分峰之后红外光谱图
(在 2000 cm⁻¹ 和 2100 cm⁻¹ 分峰)

计算

2.1 计算氢含量

岛津 IRSolution 软件直接得到峰面积，根据方程计算如下：

$$N_H = \frac{1.9 \times 10^{17} s_{N-H} + 1.4 \times 10^{17} s_{Si-H}}{d}$$

$$= 1.9 \times 10^{17} \times 0 + 1.4 \times 10^{17} \times 0.205 / (300 \times 10^{-6})$$

$$= 8.61 \times 10^{24} \text{ (原子数/cm}^3\text{)}$$

2.2 计算 R 因子

使用岛津 IRSolution 和分峰软件将峰 2000 cm⁻¹ 和 2100 cm⁻¹ 分开，然后利用软件直接给出的峰面积进行计算。

$$R(\%) = 100 \times I_{Si-H2} / (I_{Si-H} + I_{Si-H2})$$

$$= 100 \times 0.2057 / (1.4747 + 0.2057)$$

$$= 12.3\%$$

结论

本文利用岛津红外光谱仪测定了镀膜厚度为 300 nm 薄膜硅片，得到的红外光谱图用分峰软件分峰，计算得到该硅片中氢含量为 8.61 × 10²⁴ (原子数 / cm³)，R 因子为 0.123。根据薄膜中氢含量和 R 因子，对判定镀膜硅片的质量评价有一定的指导意义。