

图6 [115]硅单晶生长动力示意图

式中 $f_{[552]}$ 是沿 $[552]$ 的自然结晶动力, 即我们在文献[5]中所称的本征结晶动力; $f_{[001]} \cos 74^\circ 12'$ 为 $[001]$ 生长动力在 $[552]$ 的分量, 而在 (115) 上的其他方向不包含这个分量, 由于 $[001]$ 生长动力强于 $\langle 110 \rangle$ 和 $\langle 111 \rangle$, 所以这一分量是十分显

著的; $f_{[111]} \cos 19^\circ 28'$ 是 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 生长动力的分量。除此分析之外, 如前所说, 当方位角 $\varphi \approx \frac{\pi}{10}$ 时, 鼓棱所在方位并非 $[115]$ 指向, 而是 $[001]$ 所指方位。这也表明 $[115]$ 硅单晶鼓棱的产生同 $[001]$ 生长动力有关。一旦 $F_{[352]}$ 的生长动力与熔体表面张力 f_s 平衡时, 则形成鼓凸状的鼓棱。其形成过程, 我们已在文献[5]中分析过。

感谢区熔组和测试组以及支持过本工作的同志们。

参 考 文 献

- [1] T. F. Ciszek, *J. Electrochem. Soc.*, **120**-6(1973), 799.
- [2] A. Mayer, *Solid State Technol.*, **15**-4(1972), 38.
- [3] E. Sirtl and A. Z. Adler, *Metallk.*, **52**(1961), 529.
- [4] T. F. Ciszek *J. Crystal Growth*, **10**-3(1971), 263.
- [5] 徐文耀, 半导体技术, 6(1978), 27.

用椭圆偏振光谱法研究溅射无定形硅的光学性质

陈树光 叶贤京 莫 党 (中山大学物理系)

1980年12月2日收到

一、引 言

近年来, 由于太阳能利用等方面的需要, 无定形硅的研究在国际上得到重视和发展。无定形硅的光学性质是基础研究的重要内容之一, 与它的电子结构有密切关系。其中, 吸收系数和吸收边的研究工作较多, 折射率的研究也有一些。

Pierce 和 Spicer^[1] 测量了无定形硅的复数折射率, 求出介电常数的虚部 $\epsilon_2(E)$, 并与 Philipp 和 Ehrenreich^[2] 对单晶硅的测量结果作比较, 得到图1的结果。由图可见, 单晶硅存在三峰结构, 而在无定形硅中, 这三峰结构消失

物理

了, 只剩一个峰值较低的峰, 并且峰的位置向低能方向移动。Pierce 和 Spicer 是在很广的波长范围(相应能量 0.4 到 11.8 电子伏)内测量反射率, 然后按 Kramers-Kronig 关系, 通过积分运算求得 $\epsilon_2(E)$ 的。Philipp^[3] 也用类似方法测量无定形硅的光学性质, 结果很相似。

关于无定形硅折射率的特点, 有人认为主要是远程无序起作用, 而 Joannopoulos 和 Cohen^[4] 则尝试用近程无序作出理论解释。现在很清楚, 无定形硅由于制备方法不同或工艺条件变化而有各种不同的结构和性质, 并且也有不同的缺陷。因此, 深入研究其光学性质将有重要的意义。

椭圆偏振光谱法可用来测量非吸收薄膜的

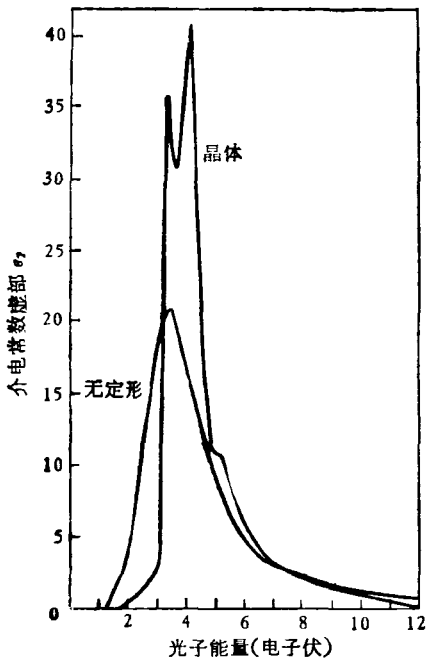


图 1

折射率和膜厚^[5],也可用来测定大块样品的折射率 n 和消光系数 k ^[6-8]. 在本工作中,我们用椭圆偏振光谱法测量无定形硅薄膜的光学性质 (n 和 k) 与波长 λ 的关系. 这方法与文献 [1-3] 等过去采用的方法相比,其优点是:它可在所测波长范围内独立地直接测出 n 和 k 值,而不必依赖 Kramers-Kronig 关系的计算. 利用 Kramers-Kronig 关系进行计算,需要有很广波长范围内的反射率测量值,对于所测波长范围外的值,则需用外推法加以估计,这样处理有时是难以做得合适的.

最近, Freeman 和 Paul^[9] 研究了溅射无定形硅的光学性质. 他们采用干涉法进行测量,故所得的 n 值都在红外范围,并且该法不能同时获得 n 和 k 值.

我们用射频溅射法制备了无定形硅薄膜,样品分掺氢与不掺氢两类. 在 4000—7000 埃的范围内测得了 n, k 值,研究了不同生长条件下 $n-\lambda, k-\lambda$ 曲线的位置和形状,并进行解释. 为了比较,也测量了单晶硅的相应数据,所得结果与现有资料十分符合.

二、测量原理

设有一吸收介质,其复数折射率 $\tilde{n} = n - ik$,当光线以入射角 φ 投射至介质表面时,其反射光和折射光如图 2 所示. p 波和 s 波的反射系数 R_p 和 R_s 由费涅耳公式决定.

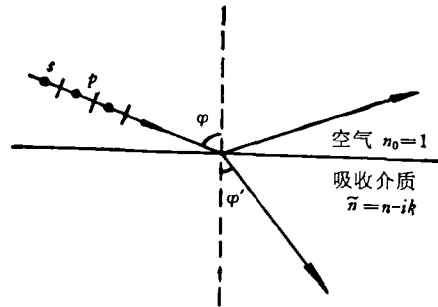


图 2

若介质足够厚,使折射光在到达另一界面以前已经完全被吸收掉,则这时的反射光不存在多光束干涉效应,与介质厚度无关. 然而,经表面反射后,反射光中的 p 波和 s 波其振幅和位相将发生变化,一般为椭圆偏振光. 其椭圆参数 Ψ 和 Δ 定义为^[10]

$$\tan \Psi e^{i\Delta} = \frac{R_p}{R_s} \quad (1)$$

根据式(1)及菲涅耳公式和折射定律公式,得

$$n^2 = k^2 + \sin^2 \varphi \times \left[1 + \frac{\tan^2 \varphi (\cos^2 2\Psi - \sin^2 2\Psi \sin^2 \Delta)}{(1 + \sin 2\Psi \cos \Delta)^2} \right], \quad (2)$$

$$k = \frac{\sin^2 \varphi \tan^2 \varphi \sin 4\Psi \sin \Delta}{2n(1 + \sin 2\Psi \cos \Delta)^2}. \quad (3)$$

可见,只要在某一波长下测得吸收介质的椭圆偏振参数 Ψ 和 Δ ,便可计算出对应该波长的 n 和 k 值. 改变波长,便可得 $(n, k)-\lambda$ 谱.

三、实验装置和样品制备

我们采用旋转检偏器的椭圆偏振光谱仪,实验装置如图 3 所示. 分光光度计射出的单色光,经凹面镜反射,作为椭圆偏振仪的入射光源;起偏器方位角固定在 45° (从入射面算起);

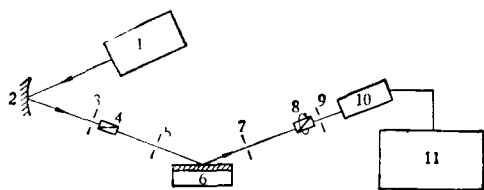


图 3

1. 分光光度计; 2. 凹面镜; 3. 5. 7. 9. 光栏; 4. 起偏器; 6. 样品; 8. 检偏器; 10. 光电倍增管; 11. 放大指示系统
检偏器可从 0 至 360° 转动, 数字显示至 0.01°; 入射角 φ 保持 70.0°.

对于某一波长, 旋转检偏器可以测得 I_{\max} , I_{\min} 及其对应的检偏器角度 θ_{\max} , θ_{\min} . 由文献 [5] 的关系式可计算出该波长下的 Ψ, Δ 值.

无定形硅样品由射频溅射方法制备. 溅射时, 真空中工作气体的压强为 5×10^{-3} 托或 1.5×10^{-2} 托; 工作气体的成份有纯 Ar 和 Ar + H₂ 两种, 氢的分压强可以改变. 衬底采用玻璃, 没有加热; 溅射时间在一小时以上, 使满足 (2), (3) 式的条件.

四、结果和讨论

对生长条件不同的无定形硅样品进行测量, 结果如图 4, 图 5 所示. 由图 4 可见, 所有无定形硅样品的 $n-\lambda$ 曲线都出现一个高峰, 峰的高度在 4.0—4.5 之间, 峰对应的波长在 4000—

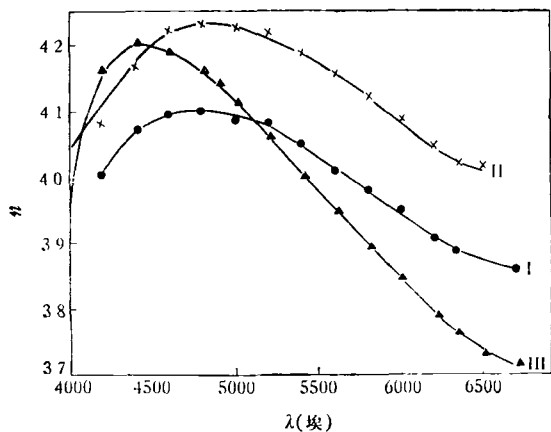


图 4

I. 纯 Ar (5×10^{-3} 托, 140 分);
II. 纯 Ar (1.5×10^{-2} 托, 90 分);
III. Ar + H₂ (5×10^{-3} 托, 140 分, H₂ 分压 20%)

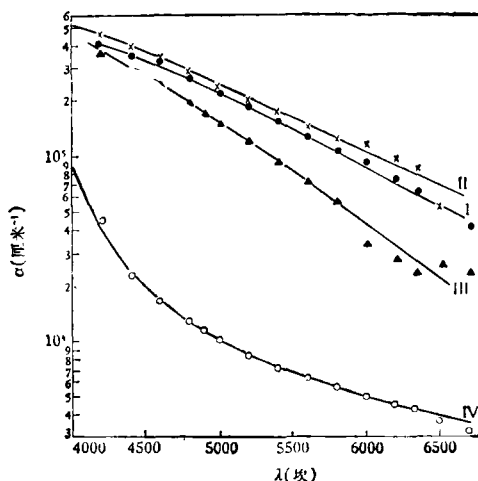


图 5

I. 纯 Ar (5×10^{-3} 托, 140 分);
II. 纯 Ar (1.5×10^{-2} 托, 90 分);
III. Ar + H₂ (5×10^{-3} 托, 140 分, H₂ 分压 20%);
IV. 硅单晶

5000 埃范围内. 已经知道, 单晶硅的 $n-\lambda$ 曲线也存在高峰, 峰很尖锐, 高度接近 7, 对应的波长约 3800 埃^[11]. 比较单晶硅和无定形硅的 $n-\lambda$ 曲线, 可以看到, 无定形硅峰的高度明显下降, 峰的位置移向长波方向. 对掺氢和不掺氢样品的 $n-\lambda$ 曲线进行比较, 可知掺氢样品的峰较陡, 且稍微向短波方向移动. 在不掺氢的情况下, 仅仅改变 Ar 气的压强, 得到的 $n-\lambda$ 曲线的形状没有明显的变化.

图 5 表示无定形硅及单晶硅^[7] 的吸收系数 α 和波长 λ 的关系. α 的数值由公式

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (4)$$

换算得来. 由图 5 可知, 在所测量的波长范围内, 所有无定形硅的吸收系数 α 都远较单晶硅大, 大部分甚至大一个数量级以上. 将不掺氢样品与掺氢样品比较, 则掺氢样品具有较小的 α 值; 在不掺氢样品中, 尽管气体压强不同, $\alpha-\lambda$ 曲线形状仍很相似. 由此可见, 样品掺氢后, 其光学性质介于单晶硅与不掺氢的无定形硅之间.

为了检查实验的准确性, 我们也对硅单晶样品进行椭圆偏振光谱的测量, 算出的 $n-\lambda$, $k-\lambda$ 值与已知的资料^[7,8] 符合得很好. 这说明,

我们的实验装置和计算方法是可靠的。

由上可见，椭圆偏振光谱法对于无定形材料的研究也是颇有用的。

参 考 文 献

- [1] D. T. Pierce, W. E. Spicer, *Phys. Rev. B*, **5** (1972), 3017.
 [2] H. R. Philipp, H. Ehrenreich, *Phys. Rev.*, **129** (1963), 1550.
 [3] H. R. Philipp, *J. Phys. Chem. Solids*, **32**(1971), 1935.
 [4] J. D. Joannopoulos, M. L. Cohen, *Solid State Commun.*, **13**(1973), 1115.
 [5] 莫党、陈树光、余玉贞、黄炳忠, *物理学报*, **29**(1980), 673.
 [6] D. E. Aspnes, *Proceeding of the Twelfth International Conference on the Physics of Semiconductors 1974*, Ed. by M. H. Pilkuhn (1974), 1197.
 [7] F. Meyer, E. E. De Kluizenaar, G. A. Boostma, *Surface Sci.*, **27**(1971), 88.
 [8] 莫党、陈树光、徐耕, *中山大学学报(自然科学版)*, **3** (1980), 45.
 [9] E. C. Freeman, W. Paul, *Phys. Rev. B*, **20**(1979), 716.
 [10] 莫党、朱雅新, *物理*, **6**(1977), 140.
 [11] H. R. Philipp, E. A. Taft, *Phys. Rev.*, **120**(1960), 37.

金属在冲击载荷作用下的熔化温度和压力的近似计算

谢盘海 (国营二九〇一厂)

1980年7月22日收到

目前，一般都是根据固体的某个熔化方程和 $P-T$ (P 为压力, T 为温度) 形式的冲击绝热线, 来确定晶体在冲击熔化点的压力和温度. 这种方法的缺点是计算烦杂. 本文提出了一个假设的熔化条件, 然后借助 Grüneisen 状态方程等关系式, 导出了金属冲击熔化开始时的温度、压力等参数计算公式. 尽管在公式的推导过程中作了必要的简化, 但仍然获得了较满意的结果.

一、晶体的熔化

由图 1 可以看出, 当晶体的比容 $V > V_m$ 时 (V_m 是零压下对应于 $\frac{dP_x}{dV} = 0$ 时晶体的比容), 原子间的引力变小. 如果温度上升到足以使晶体原子的热振动达到 V_m 的地步, 就有可能克服原子间的相互作用, 从格点 α 位置跃迁到 β 位置 (见图 2). 这种大量原子的跃迁, 造成了晶格的崩溃. 脱离了格点位置的原子将重新组成新的状态, 即熔化状态.

根据以上分析, 我们可以假定, 当原子的平

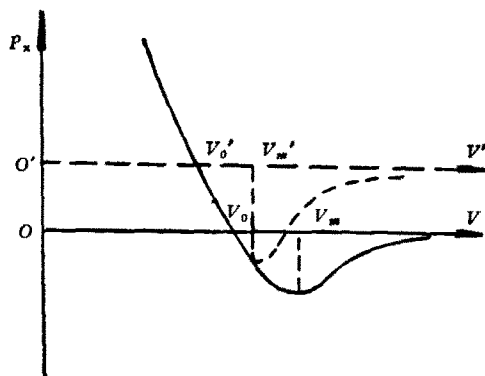


图 1 原子间的相互作用

实线为零压下的相互作用力; 虚线为高压下的相互作用力

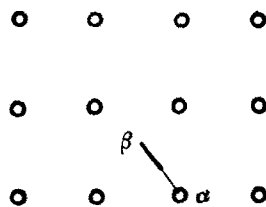


图 2 原子由正常的 α 格点位置向间隙 β 位置的跃迁

均热运动能 E_T 等于势能 $E_x(V_m)$ 时, 晶体便处于熔化状态.