

DETERMINAÇÃO DE CONSTANTES ÓPTICAS DE FILMES FINOS UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA VISÍVEL

Talitha Castro Costa Ramos, Johnny Vilcarromero López

UNIVAP – Universidade do Vale do Paraíba, IP&D - Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento, Av. Shishima Hifumi, 2911 Urbanova, São José dos Campos - SP - Brasil, tccramos@pop.com.br

Resumo - Neste trabalho apresentaremos resultados sobre a determinação de constantes ópticas de filmes finos de GaAs amorfo obtidas utilizando os espectros de espectroscopia de transmissão no visível. Expressões para a transmissão em um filme fino absorvente sobre um substrato foram manipuladas a fim de produzir fórmulas para o índice de refração e o coeficiente de absorção de acordo com o procedimento descrito por Swanepoel. Resultados do cálculo da espessura de vários filmes finos de GaAs amorfo estão sendo apresentados. Um método alternativo para corrigir erros e obter dados precisos da espessura é também apresentado e discutido. O cálculo do coeficiente de absorção dos filmes finos de GaAs amorfos estão sendo apresentados, os quais foram determinados utilizando os dados fornecidos pelo espectro de transmissão no visível.

Palavras-chave: Constantes ópticas, filmes finos, amorfos, coeficiente de absorção.

Área do Conhecimento: I – Ciências Exatas e da Terra

Introdução

Filmes finos são utilizados em diversas aplicações tecnológicas atuais. Elas vão desde aplicações como dispositivos fotovoltaicos até parte de computadores ou aparelhos eletrônicos. Normalmente os filmes possuem uma estrutura amorfa com espessuras que variam de 10 nm até vários micrometros. O conhecimento de algumas constantes ópticas como o índice de refração (n) e o coeficiente de absorção (α) como função do comprimento de onda são importantes a fim de definirmos o seu comportamento óptico e possível aplicação e algum dispositivo optoeletrônico. A espessura de filmes pode ser determinada usando vários métodos desde mecânicos até ópticos [1-2].

O método mostrado neste trabalho baseia-se no procedimento proposto por Swanepoel [1] a fim de determinar n e α . Na determinação das constantes ópticas somente o espectro de transmissão na região óptica é considerado. A seguir então mostraremos os resultados ópticos utilizando este procedimento e discutiremos um método alternativo para determinação destas constantes ópticas para amostras com pouca uniformidade ou rugosidade.

Descrição Teórica

De acordo com o procedimento descrito por Swanepoel para determinação de constantes ópticas de filmes finos podemos considerar o seguinte: Se a espessura d (no filme) não é uniforme, todos os efeitos da interferência são destruídos e a transmissão é uma curva uniforme.

Consideremos então d como a espessura, n o índice de refração e α o coeficiente de absorção de um determinado filme fino sobre um substrato transparente, normalmente vidro ou quartzo. O espectro pode ser dividido em quatro regiões. i) Na região transparente, $\alpha = 0$ e a transmissão é determinada somente por n e s . Sendo s o índice de refração do substrato, normalmente considerado o valor de 1,51. ii) Na região de fraca absorção α começa a reduzir a transmissão. iii) Na região de média absorção, o valor de α é grande e a transmissão decresce. iv) Na região de forte absorção a transmissão decresce drasticamente devido quase exclusivamente a influência de α .

Se a espessura do filme fino sobre o substrato é uniforme, os efeitos da interferência crescem constantemente na curva do espectro de transmissão, como mostrado na figura 2. Essas interferências podem ser usadas para calcular as constantes ópticas de um filme fino sobre um substrato transparente, conforme procedimento mostrado por Swanepoel [1].

A equação básica para interferências é

$$2nd = m \lambda \quad (1)$$

A transmissão T é uma função completa e é dada pela expressão:

$$T = \frac{A'x}{B' - C'x + D'x^2} \quad (A1)$$

onde

$$A' = 16s(n^2 + k^2)$$

$$B' = [(n+1)^2 + k^2][(n+1)(n+s^2) + k^2]$$

$$C' = [(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2) - 2k^2(s^2 + 1)]$$

$$2 \cos \varphi - k[2(n^2 - s^2 + k^2) + (s^2 + 1)(n^2 - 1 + k^2)] 2 \sin \varphi$$

$$D' = [(n-1)^2 + k^2][(n-1)(n-s^2) + k^2]$$

$$\varphi = 4\pi nd / \lambda,$$

$$x = \exp(-\alpha d),$$

$$a = 4\pi k / \lambda$$

Se s for conhecido, é conveniente escrever a equação mencionada acima nos termos de n e do coeficiente de absorção x , onde x é definido pela equação

$$T = T(n, x) \quad (2).$$

Podemos usar as equações:

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

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad (4)$$

Onde:

$$A = 16n^2 s \quad (5a)$$

$$B = (n+1)^3 (n+s^2) \quad (5b)$$

$$C = 2(n^2 - 1)(n^2 - s^2) \quad (5c)$$

$$D = (n-1)^3 (n-s^2) \quad (5d)$$

$$x = \exp(-\alpha d) \quad (5e)$$

Na região de fraca e média absorção estão os efeitos de interferência, como mostrados na figura 2. Temos que $\alpha \neq 0$ e x é menor que 1. Se subtrairmos o resultado da equação (3) com o da equação (4) temos uma expressão que é independente de x :

$$\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T_M} = \frac{2C}{A} \quad (6)$$

Substituindo a equação (5) na equação (6) temos:

$$n = \left[N + (N^2 - s^2)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (7)$$

A equação (7) pode ser usada para calcular $n(\lambda)$. Uma vez que $n(\lambda)$ é conhecida, todas as constantes da equação (5) são conhecidas e x pode ser calculado de várias maneiras.

Na região de forte absorção as interferências desaparecem, mas as formas de calcular n e x não se alteram por esse motivo.

Determinação da Espessura e Constantes Óticas

Os valores de n e de α podem ser calculados utilizando o seguinte procedimento, chamado de aproximação infinita do substrato. Nesta condição

uma outra expressão para a transmissão T pode ser utilizada cuja expressão é da forma:

$$T = \frac{A''x}{B'' - C''x + D''x^2} \quad (8)$$

onde

$$A'' = 16s(n^2 + k^2)$$

$$B'' = [(n+1)^2 + k^2][(n+s)^2 + k^2]$$

$$C'' = [(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2) + 4k^2s]$$

$$2 \cos \varphi - k[2(n^2 - s^2 + k^2) + 2s(n^2 - 1 + k^2)]$$

$$2 \sin \alpha$$

$$D'' = [(n-1)^2 + k^2][(n-s)^2 + k^2]$$

Esta condição leva em conta que a espessura do substrato é suficientemente grande comparado com a espessura do filme, que normalmente a sua razão é da ordem de 100. Também leva em conta que as múltiplas reflexões provenientes na parte interna do substrato são desprezíveis.

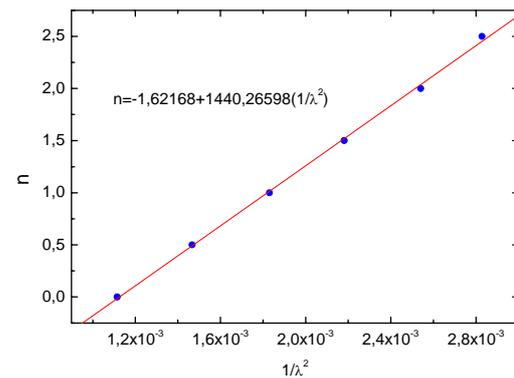


Figura 1 Gráfico do índice de refração (n) como função do inverso quadrado do número de ordem de um filme fino de GaAs amorfo.

Como mencionado anteriormente, consideramos o índice de refração do substrato (s) conhecido da ordem de $s = 1,51$ para vidros corning 7059. Para calcular o valor de n os valores de T_M e T_m das equações (3) e (4) precisam ser determinados para valores diferentes de λ e obtidos a equação (7). Considerados estes valores, um gráfico n como função de λ é considerado, para depois uma aproximação de

$$n = \frac{A}{\lambda^2} + B$$

ser utilizada para determinar os verdadeiros valores de n em função de λ .

Para a determinação da espessura utiliza-se o seguinte procedimento. Valores de m e d são determinados por um simples método gráfico. Para este fim precisamos considerar que o número de

ordem do primeiro extremo seja m_1 . Assim a equação (1) pode ser escrita para os extremos do espectro da forma:

$$l/2 = 2d(n/\lambda) - m_1 \quad (9).$$

O método gráfico é muito simples como mostrado na figura 1. No princípio somente os valores do λ e dos extremos de n são necessários para determinar o número de ordem m e a espessura d .

Para a determinação do coeficiente de absorção α devemos calcular primeiro os valores de x e d e utilizar a equação (5e) usando os dados de T_M e T_m . Ela é representada em cm^{-1} como mostrado na figura 3. Os valores de x podem ser calculados a partir da equação (10), considerando a aproximação infinita do substrato, usando o valor de T_α da equação.

$$T_\alpha = \sqrt{T_M T_m}$$

$$x = \{P + [P^2 + 2QT\alpha(1 - R_2 R_3)]^{1/2}\} / Q \quad (10)$$

onde

$$Q = 2T\alpha(R_1 R_2 + R_1 R_3 - 2R_1 R_2 R_3)$$

$$P = (R_1 - 1)(R_2 - 1)(R_3 - 1)$$

$$R_1 = [(1 - n)/(1 + n)]^2$$

$$R_2 = [(n - s)/(n + s)]^2$$

$$R_3 = [(s - 1)/(s + 1)]^2$$

Uma vez que $\alpha(\lambda)$ é conhecido, k pode ser calculado pela equação $k = \alpha\lambda / 4\pi$ (11) na qual termina o cálculo das constantes ópticas.

Resultados

A figura 2 mostra o espectro de transmissão obtido por espectroscopia no visível. Os dados foram obtidos num espectrômetro λ -9 da PerKin Elmer na faixa de 2500 nm até 500 nm. Os espectros mostram claramente a interferência produzida entre o filme fino e o substrato. A figura mostra 3 tipos característicos de dados obtidos para filmes finos de GaAs amorpho. A partir deste gráfico que obtemos os valores de T_M e T_m , que representam os pontos máximos e mínimos nas franjas de interferência mostradas na figura. Alguns valores são determinados por interpolação entre valores próximos.

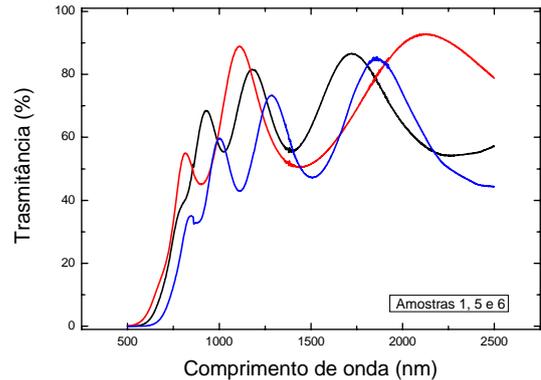


Figura 2. Espectro de transmissão no visível de amostras de GaAs amorphas.

A figura 3 apresenta o gráfico do coeficiente de absorção (α) como função da energia de várias amostras de GaAs amorpho. O coeficiente de absorção α foi determinado utilizando a expressão da equação (10) e os dados descritos anteriormente. Os dados representam as amostras da tabela 1, amostra 1, 5 e 6.

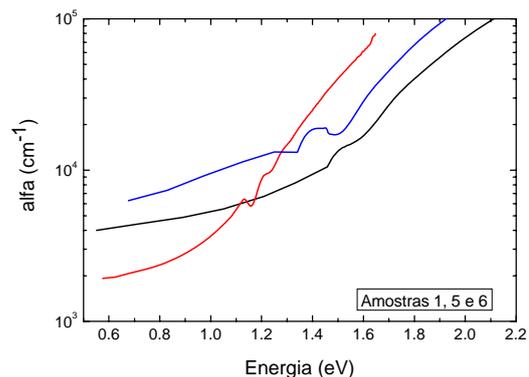


Figura 3. Gráfico de alfa como função da energia determinados para amostras de GaAs amorpho.

A tabela 1 apresenta dados das constantes ópticas obtidas das amostras de GaAs amorphas apresentadas. Os valores de n_0 foram obtidos de acordo com o procedimento descrito anteriormente e utilizando o modelo da figura 1. Os valores da espessura d foram obtidos também através do método gráfico citado anteriormente. Os valores de E_{04} (Energia correspondente ao valor do coeficiente de absorção óptica em 10^4) obtidos através do gráfico do coeficiente de absorção (α) como função da energia. Os valores de E_{Tauc} obtidos através do procedimento descrito por Tauc e o gráfico da raiz quadrada da energia, índice de refração e coeficiente de absorção como função da energia, como mostrado na figura 4. Para este último realizamos um Fit polinomial desse gráfico,

temos uma equação e através dela encontramos o E_{Tauc} ; e finalmente os valores de k obtidos através da equação (11) mencionada anteriormente.

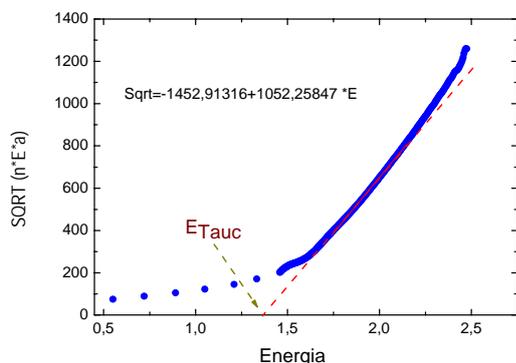


Figura 4. Gráfico da raiz quadrada da energia, índice de refração e coeficiente de absorção como função da energia determinados usando o procedimento descrito no texto para um filme fino de GaAs amorfo.

Tabela 1. Dados das constantes ópticas determinadas para amostras de GaAs amorfo.

amostra	n_0	d	E_{04}	E_{Tauc}	k ($\lambda = 800$ nm)
1	2,48	720	1,44	1,38	0,09
2	1,67	6172,5	1,27	0,94	
3	2,10	398	1,18	1,48	0,14
4	1,92	6720,5	1,22	0,86	
5	2,72	2081	1,24	1,10	0,32
6	2,64	619	1,03	1,41	0,13
7	2,28	2038,5	1,48	1,28	0,09
8	2,61	1963	1,4	1,22	0,14
9	2,42	1809,5	1,35	1,2	0,17
10	2,34	1973,5	1,33	1,19	0,17
11	2,15	1847,5	1,35	1,19	0,17
12	2,25	1956,5	1,33	1,19	0,18
13	2,16	2285	1,45	1,17	0,10
14	2,49	1048,5	1,33	1,19	0,16

Discussão

A tabela 1 mostra os dados obtidos para as constantes ópticas de filmes finos de GaAs amorfo de acordo com o procedimento descrito por Swanepoel e mostrado neste resumo. Os dados da espessura e de várias constantes ópticas mostram bastante coerência de acordo com amostras estudadas anteriormente. No entanto, o comportamento crescente da interferência na medida que aumenta o comprimento de onda, não

é observado em todas as amostras descritas neste texto. A variação na interferência é devida a problemas de alta rugosidade na superfície do filme fino, este efeito não é levado em conta no procedimento descrito anteriormente. A fim de corrigir este inconveniente, Swanepoel também propôs outro procedimento descrito no artigo [2].

Este procedimento será discutido na apresentação, ele apresenta as correções necessárias, como a rugosidade, que devem ser levadas em conta a fim de determinar as constantes ópticas e a espessura dos filmes com alto grau de rugosidades, maiores a 10 nm. Entretanto, os resultados mostrados neste resumo são satisfatórios e mostram alguns comportamentos interessantes que depois serão aprimorados na medida que as correções mencionadas sejam incorporadas.

Conclusão

Fórmulas e procedimentos foram apresentados para calcular $n(\lambda)$, α e d em filmes finos utilizando espectroscopia no visível. O procedimento utilizado está de acordo com a proposta formulada por Swanepoel. Esse procedimento tem sido usado em um grande número de filmes finos com pouca rugosidade superficial. Utilizando este procedimento obtemos resultados satisfatórios de constantes ópticas e da espessura. No entanto, a fim de obtermos resultados melhores é necessário introduzir as correções de rugosidade.

Referências

- [1] Swanepoel, R. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. 1983. 9 f. J. Phys. E: Sci. Instrum. Printed in Great Britain. Vol. 16.
- [2] Swanepoel, R. Determination of surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films. 1984. 8 f. J. Phys. E: Sci. Instrum. Printed in Great Britain. Vol. 17.
- [3] L. H. Ouyang, D. L. Rode, T. Zulkifli e Barbara Abraham-Shrauner, Hydrogenated amorphous and microcrystalline GaAs films prepared by radio-frequency magnetron sputtering. Apply Physic Journal – Vol.96, nº 5, march 2002.
- [4] Fan Jiang, Michael Stavola, M. Capizzi e A. Polimeni, Vibrational spectroscopy of hydrogenated GaAs_{1-y}N_y: A structure-sensitive test of an H₂^{*}(N̄) model. Physic Review B, nº69, September 2004.