



Ellipsometrie und optische Konstanten von SiN_x und SiO_y für Bragg-Reflektoren

R.Schmidt¹, D.Pudis², B.Rheinländer^{1,*}, V.Riede¹, S.Hardt¹, V.Gottschalch³, J.Kvietková¹

¹ Fakultät für Physik und Geowissenschaften, Abt. Halbleiterphysik, Universität Leipzig, Linnéstr. 5, D-04103 Leipzig
² Slovak University of Technology, Dept. of Microelectronics, Ilkovicova 3, SK-812 19 Bratislava, Slovakia
³ Fakultät für Chemie und Mineralogie, AK Halbleiterchemie, Universität Leipzig, Linnéstr. 3, D-04103 Leipzig
* e-mail: rheinlae@physik.uni-leipzig.de

Einführung und Prinzip

Dielektrische Bragg-Spiegel spielen eine zunehmende Rolle für optoelektronische Bauelemente. Sie dienen als Resonator-Spiegel in Mikrospektrometern bei Lichtemittern und -detektoren, wodurch Halbleiter-Bragg-Spiegel ersetzt werden können [1-3]. Bei Anwendungen mit kantemittierenden Laserdioden werden sie zur Reflexionserhöhung der Endspiegel [4-6] und als äußere Auskuppelungsspiegel [7,8] eingesetzt.
Dielektrische Spiegel bestehen aus Paaren von $\lambda_0/4$ -Schichten, hergestellt z.B. aus SiN_x, SiO₂ bzw. amorphem Silizium (siehe Skizze unten). Um die Paarzahl N klein zu halten (N < 10), sollten sich die Brechungsindizes der eingesetzten Materialien möglichst stark voneinander unterscheiden. Dabei müssen die Materialien so gewählt werden, dass die Absorption im Spektralbereich der Bragg-Reflexionsbande hinreichend gering bleibt, um das Durchdringen des Lichtes durch den gesamten Spiegel zu gewährleisten. Aus diesem Grunde kommen für Anwendungen in Sichtbaren nur Materialkombinationen mit SiN_x und SiO₂ infrage. In der vorliegenden Arbeit werden die optischen Konstanten von SiN_x und SiO₂ mittels spektroskopischer Ellipsometrie und optischer Transmission bestimmt. Das Reflexionsvermögen in der Bragg-Bande wird mit Hilfe dieser Daten simuliert und mit geeichten Reflexionsmessungen verglichen.



$$\lambda_0 = \lambda(\text{spektrale Mitte der Bragg-Bande})$$

$$n_1 d_1 = \frac{\lambda_0}{4}$$

Experimentelles

Probenpräparation

Die SiN_x- und SiO₂-Schichten wurden mittels plasmaestützter Gasphasenabscheidung (PECVD) bei 13,56 MHz in einer kommerziellen Anlage "Plasmalab 80 plus" dargestellt [9]. Die dielektrischen Filme wurden mit einer Leistungsdichte von ca. 22 mW/cm² unter einem Druck von 1 Torr bei verschiedenen Temperaturen zwischen 90°C und 300°C abgeschieden. Für die dünnen SiN_x- und SiO₂-Schichten wurden die Gasgemische (SiH₄ (2% in N₂) / NH₃) bzw. (SiH₄ (2% in N₂) / N₂O) eingesetzt. Bei SiN_x wurde der Ammoniakanteil x im Gemisch zwischen x = 0 (a-Si) und 0,737 variiert. Sowohl Einzelschichten mit Dicken im Bereich von 40 bis 200 nm als auch Bragg-Spiegel wurden jeweils gleichzeitig auf (111) Si-, (111) GaAs- und Glas-Substraten (letztere für Transmissionsmessungen) hergestellt.

Optische Messungen

Die spektroskopische Ellipsometrie erfolgte mit einem J.A.Woollam V.A.S.E.-Ellipsometer, das in der RAE-Mode arbeitet. Die Ψ- und Δ-Spektren wurden im Spektralbereich 0,8 bis 4,3 eV für Einfallswinkel zwischen 65° und 74° gemessen. Die Parameter Ψ und Δ sind durch das Amplitudenverhältnis tanΨ bzw. die Phasenverschiebung Δ der p- und s-polarisierten Anteile der von der Probenoberfläche reflektierten Welle definiert:

$$\Psi = \arctan\left(\frac{r_p}{r_s}\right) = \tan \Psi \exp(i\Delta)$$

wobei r_p und r_s die entsprechenden komplexen Fresnel-Reflexionskoeffizienten sind.

Einzelschichten

Alle Ψ- und Δ-Spektren für Proben gleichen Schichtmaterials mit drei verschiedenen Schichtdicken jeweils auf Si- und GaAs-Substraten wurden simultan an ein parametrisches Modell für die komplexe dielektrische Funktion angepasst [10]. Die dabei gewonnenen Absorptionsspektren wurden mit Daten verglichen, die aus Transmissionspektren der Proben auf Glas-Substraten gewonnen wurden.

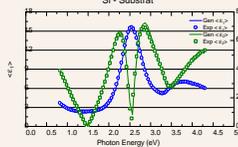
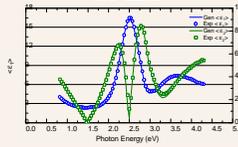
Bragg-Spiegel

Die Reflexionsvermögen wurden auf zweierlei Weise bestimmt: 1. mittels Messung an einem Lambda 19 - Spektrometer und 2. mittels Simulation unter Verwendung der optischen Konstanten aus der Einzelschichtenellipsometrie und den Schichtdicken, die mittels spektroskopischer Ellipsometrie ermittelt worden waren.

Ellipsometrie an Einzelschichten

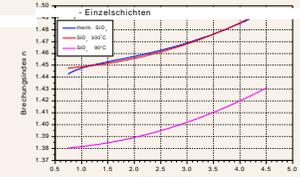
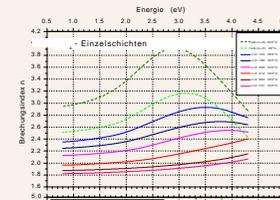
SiN_x - Einzelschicht mit x(NH₃) = 0.104

| Modell | χ | λ [nm] |
|----------------------------|-------|--------|
| SiO ₂ | 0 | 17 |
| SiN _x (x=0.104) | 0.104 | 95 |
| Si- oder GaAs-Substrat | 0 | 0.3 |



Pseudo-dielektrische Funktion des Systems Schicht-Substrat

Optische Konstanten



Brechungsindex von SiO₂ abgeschieden bei 90°C und 300°C und von thermischem SiO₂

Die Spektren des Brechungsindex n für SiN_x verlaufen im Spektralbereich unter 4,3 eV nur für x ≥ 0,412 monoton. In allen anderen Fällen führt die für wachsende Energie stark einsetzende Absorption zu einer Abnahme von n bei hohen Energien. Für niedrige Energien stimmen die n-Werte gut mit denen von Piccirillo und Gobbi [11] überein.

Sowohl der Brechungsindex n als auch der Absorptionsindex k hängen sehr stark vom Ammoniak-Anteil in Gasgemisch bei der Abscheidung ab.

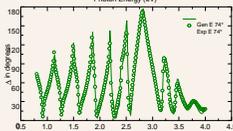
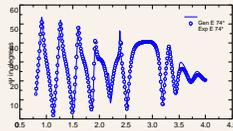
Ellipsometrie und Reflexion an Bragg -Spiegeln

8,5 Paare SiO₂ / SiN_x mit x=0.412 (Probe 21)

Modell für Ellipsometrie

| SiO ₂ | 1,6 nm |
|----------------------------|---------|
| SiO ₂ | 3,3 nm |
| SiN _x (x=0.412) | 62,5 nm |
| SiO ₂ | 62,5 nm |
| Si-Substrat | 88,2 nm |
| Si-Substrat | 93,5 nm |

Inhomogenität aller Schichtdicken: Δd = 1,8%

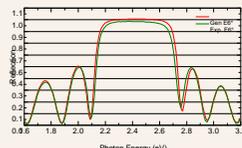


Ellipsometrische Parameter des Bragg-Spiegels

Modell für Reflexion

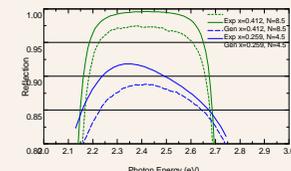
| SiO ₂ | 1,6 nm |
|----------------------------|---------|
| SiO ₂ | 3,3 nm |
| SiN _x (x=0.412) | 62,5 nm |
| SiO ₂ | 62,5 nm |
| Si-Substrat | 88,2 nm |
| Si-Substrat | 93,5 nm |

Inhomogenität aller Schichtdicken: Δd = 1,8%
Öffnungswinkel des einfallenden Strahles: 10,1°

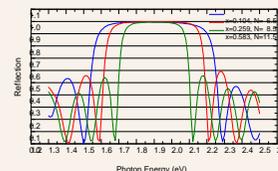


Simuliertes und gemessenes Reflexionsvermögen des Bragg-Spiegels

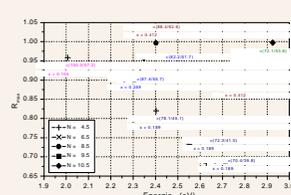
Die sehr gut erreichbare Anpassung der Ellipsometrie-Spektren für die Bragg-Spiegel liefert für alle Proben eine mittlere Inhomogenität jeweils aller Schichtdicken im Bereich um 2%. Der Vergleich der für einen Einfallswinkel von 6° gemessenen mit den simulierten Reflexionspektren zeigt eine befriedigende spektrale Übereinstimmung, wenn für das Reflexionsexperiment ein Öffnungswinkel des einfallenden Strahles von ca. 10° berücksichtigt wird. Die zu niedrig gemessenen Reflexionswerte im Plateau der Bragg-Bande können sowohl auf Lichtverluste infolge nichtidealer Ober- und Grenzflächen als auch auf den Messfehler von ±1% zurückgeführt werden.



Einfluss der Absorption auf die Linienform der Bragg-Bande



Abhängigkeit der Breite der Bragg-Bande von x und N



Einfluss der Absorption und der Schichtpaarzahl auf das maximale Reflexionsvermögen der Bragg-Bande

Schlussfolgerungen und Zusammenfassung

Die optischen Konstanten von PECVD-abgeschiedenen amorphen SiN_x- und SiO₂-Einzelschichten wurden mittels spektroskopischer Ellipsometrie und aus Messungen der optischen Transmission bestimmt. Sowohl der Brechungsindex als auch der spektrale Einsatz der Absorption des SiN_x hängen stark vom Ammoniak-Anteil x im Gasgemisch SiH₄ / NH₃ ab. Für wachsendes x lässt sich der Absorptionseinsetz gegenüber a-Si (x = 0) weit ins Blaue verschieben. Auf der Basis dieser Materialien wurden erstmals dielektrische Bragg-Spiegel für den Wellenlängenbereich von 400 bis 1600 nm mit Schichtpaarzahlen N < 10 und einem maximalen Reflexionsvermögen R_{max} im Zentrum der Bragg-Bande größer als 99,5% hergestellt. Paarzahl, Wellenlängenbereich und Reflexionsvermögen werden durch die maximale Differenz der Brechungsindizes der beteiligten Materialien in denjenigen Spektralbereichen bestimmt, für die die Absorption in den Schichten vernachlässigbar klein ist. Mit Hilfe des PECVD-Verfahrens lassen sich auch Mikrospiegel auf strukturierten Substraten herstellen.

Literatur

- [1] J.Jacquet, P.Salet, A.Plais, F.Brillouet, E.Derouin, L.Goldstein, C.Fortin, F.Gaborit, P.Pagnod, H.Bissessur, J.-L.Lafayette, F.Gerard, J.Pasquier, C.Stark, J. Phys. IV France 9 (1999) [Pr2-2]
- [2] K.A.Black, P.Abraham, A.Keating, Y.J.Chiu, E.L.Hu, J.E.Bowers, 11th Intern.Conference on Indium Phosphide and Related Materials, Davos (1999) 271
- [3] M.Grundmann, Physica E 5 (1999) 167
- [4] J.L.Fitz, S.C.Horst, D.S.Hinkel, H.Turk, Appl. Phys. Lett. 77 (2000) 1756
- [5] C.-C.Lin, K.-S.Liu, M.-C.Wu, S.-C.Ko, W.-H.Wang, Jpn. J. Appl. Phys. 37 (1998) 6399
- [6] H.Temkin, N.K.Dutta, T.Tanban-Ek, R.A.Logan, A.M.Sergant, Appl.Phys.Lett. 57 (1990) 1610
- [7] S.S.Ou, J.J.Yang, M.Jansen, Appl. Phys. Lett. 63 (1993) 3262
- [8] S.S.Ou, M.Jansen, J.J.Yang, M.Sergant, Appl. Phys.Lett. 59 (1991) 1037
- [9] V.Gottschalch, D.Pudis, J.Kvietková, S.Hardt, B.Rheinländer, G.Wagner, R.Franzheld, Thin Solid Films (eingereicht)
- [10] WVASE Software by J.A.Woollam Co.
- [11] A.Piccirillo, A.L.Gobbi, J. Electrochem. Soc. 137 (1990) 3910