

ОПТИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ И ОЦЕНКА ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ МЕЗОПОРИСТОГО КРЕМНИЯ С РАЗЛИЧНОЙ ТОЛЩИНОЙ В ДИАПАЗОНЕ ЭНЕРГИЙ ФОТОНОВ 0,1-6,2 эВ

Н.Г. ГАЛКИН¹, Д.Т. ЯН², К.Н. ГАЛКИН¹, А.М. МАСЛОВ¹

¹ ИНСТИТУТ АВТОМАТИКИ И ПРОЦЕССОВ УПРАВЛЕНИЯ ДВО РАН, РОССИЯ, 690041, ВЛАДИВОСТОК, УЛ. РАДИО, 5

² ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ПУТЕЙ СООБЩЕНИЯ, РОССИЯ, 680021, ХАБАРОВСК, УЛ. СЕРЫШЕВА, 47

ПРИБОРЫ И ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

- **ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ: HITACHI U-3010 С ИНТЕГРИРУЮЩЕЙ СФЕРОЙ**
- **ИК-ФУРЬЕ СПЕКТРОСКОПИЯ: BRUKER VERTEX 80V С ИНТЕГРИРУЮЩЕЙ СФЕРОЙ**
- **СКАНИРУЮЩАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ (СЭМ): HITACHI S-3400 N С ПРИСТАВКОЙ ДЛЯ ЭНЕРГОДИСПЕРСИОННОГО АНАЛИЗА (ЭДА)**
- **АТОМНАЯ СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ (АСМ): SOLVER P47 (NTM-DT)**

ПРИБОРЫ И ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

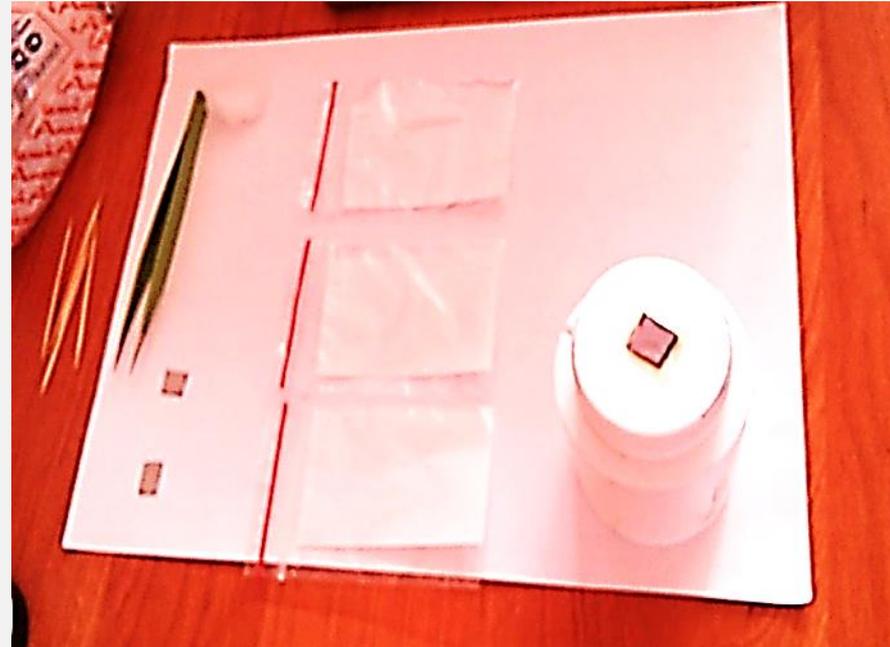
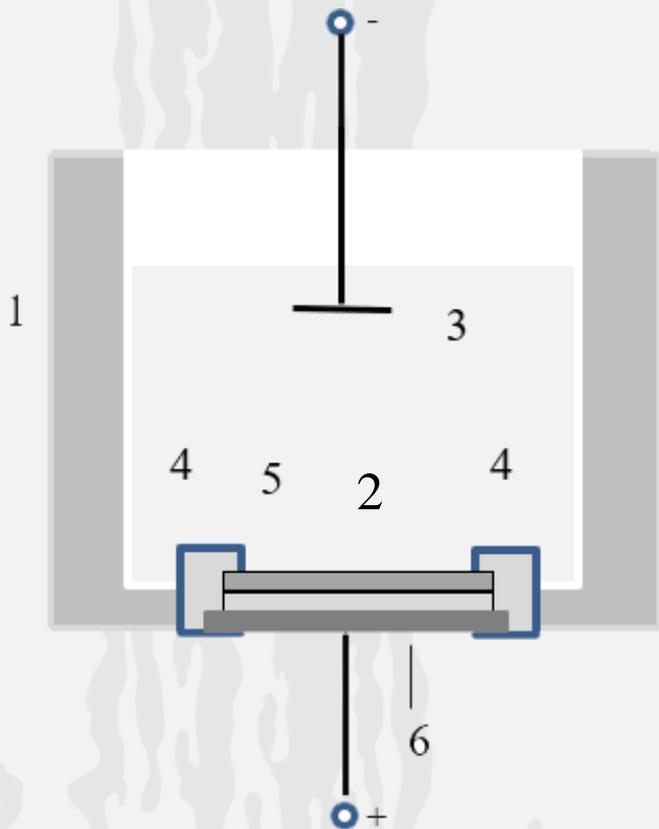


Рис.1. Электролитическая ячейка для формирования слоев мезопористого кремния: *а* – схема ячейки; *б* – фото экспериментальной ячейки; 1 – фоторопластовая ванна; 2 – кремниевая пластина; 3 – платиновый электрод; 4 – уплотнители; 5 – слой пористого кремния; 6 – металлический электрод

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

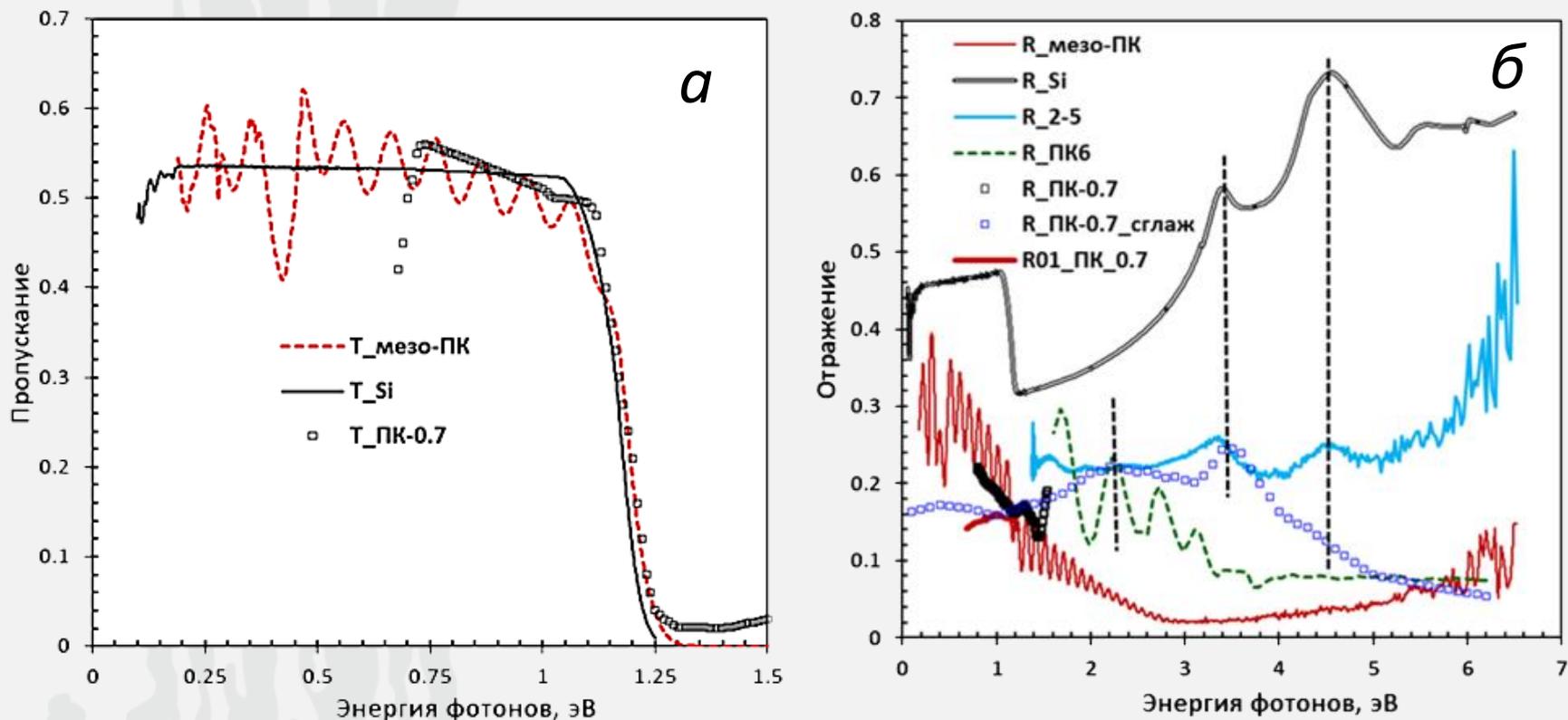


Рис.2. Спектры пропускания (а) и отражения (б) образцов монокристаллического кремния (с-Si) и мезопористого кремния в диапазоне энергий 0,1-6,2 эВ

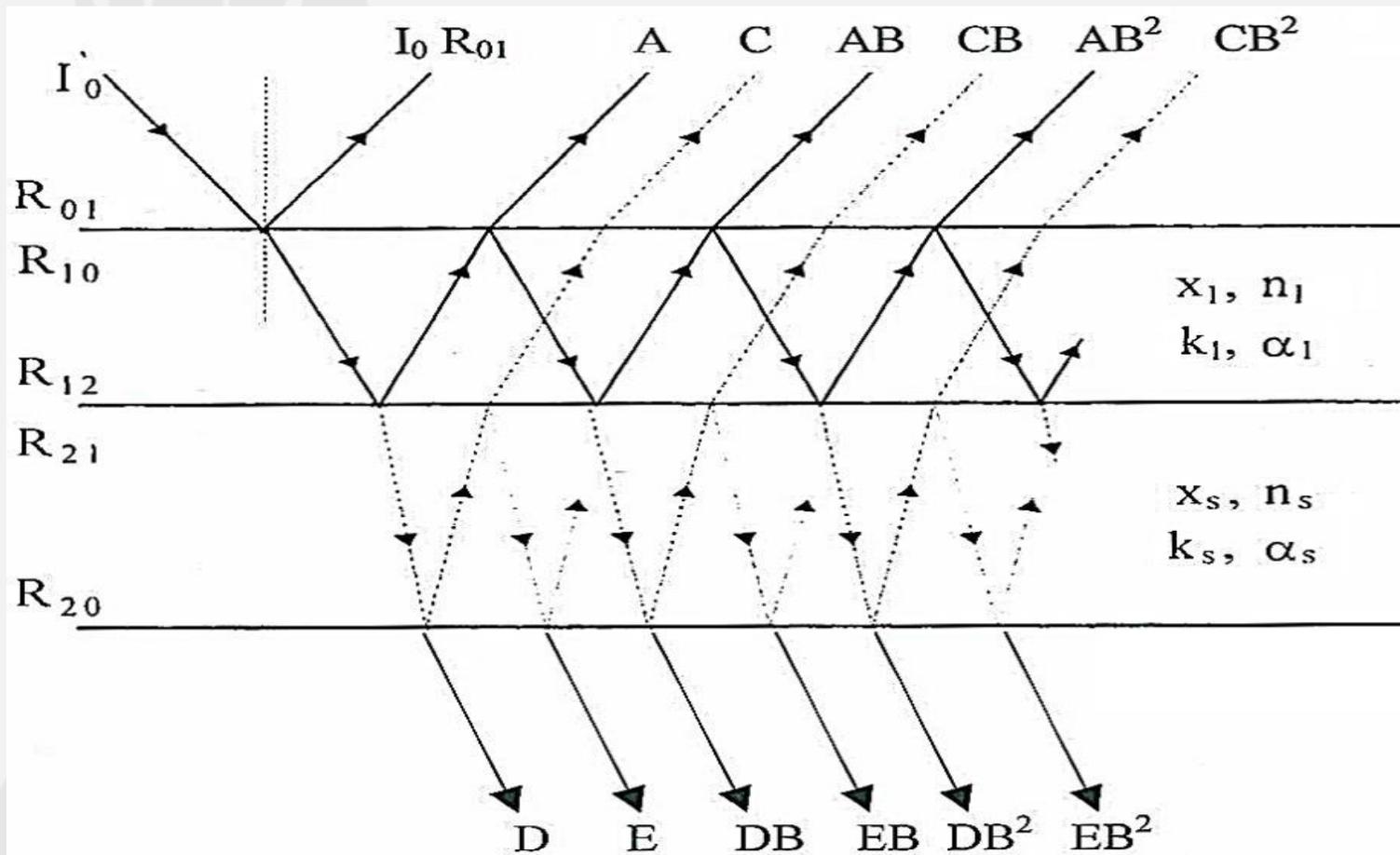
Таблица 1. Параметры слоев мезопористого кремния и значения энергии зоны их сильного поглощения

Образец	Продолжительность травления, мин	Толщина слоя мезо-ПК, мкм	Энергии зоны сильного поглощения, эВ
ПК1	1	0,8	5,1–5,27
ПК2	2	1,21	4,09–4,27
ПК4	4	1,52	3,72–4,05
ПК6	6	1,9	3,53–3,72
ПК8	8	2,07	3,35–3,51
ПК12	12	2,15	3,21–3,35

Расчеты с использованием интерференционных пиков в спектре отражения:

$$2nd \left(\frac{1}{\lambda_r} - \frac{1}{\lambda_{r+1}} \right) = 0$$

РАСЧЕТ ОПТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ МЕЗО-ПК ПО ДВУХСЛОЙНОЙ МОДЕЛИ



Оптические характеристики мезопористого кремния

Кoeffициент отражения

$$R_{01} = R_{10} = \frac{(n_1 - 1)^2 + k_1^2}{(n_1 + 1)^2 + k_1^2}$$

$$R_{02} = R_{20} = \frac{(n_s - 1)^2 + k_s^2}{(n_s + 1)^2 + k_s^2}$$

$$R_{12} = R_{21} = \frac{(n_1 - n_s)^2 + (k_1 - k_s)^2}{(n_1 + n_s)^2 + (k_1 + k_s)^2}$$

Кoeffициент пропускания

$$T_n = \frac{(1 - R_{01})(1 - R_{20})(1 - R_{12})e^{-a_1 x_1 - a_s x_s}}{(1 - R_{21} R_{20} e^{-2a_s x_s})(1 - R_{01} R_{12} e^{-2a_1 x_1}}$$

$R_{01} = R_{10}$ – коэффициент отражения мезопористого кремния (мезо-ПК)

$R_{01} = R_{10}$ – коэффициент отражения подложки (с-Si)

$R_{12} = R_{21}$ – коэффициент отражения от границы мезо-ПК – крист. кремний

R, T – отражение и пропускание структуры

n_1 – показатель преломления пленки

n_s – показатель преломления подложки

k_1 – коэффициент экстинкции пленки

k_s – коэффициент экстинкции подложки

α_1 – коэффициент поглощения пленки

α_s – коэффициент поглощения подложки

x_1 – толщина пленки

x_s – толщина подложки

 Двухслойная модель: Galkin N.G., Maslov A.M., Konchenko A.V. Optical and photospectral properties of CrSi2 A-type epitaxial films on Si(111) // Thin Solid Films. – 1997. – V. 311. – Iss. 1–2. – P. 230–238.

ДИСПЕРСИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ КРАМЕРСА-КРОНИГА

комплексная диэлектрическая проницаемость:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$$

комплексный показатель преломления:

$$n(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$$

комплексный коэффициент отражения:

$$\ln(r(\omega)) = \ln(\sqrt{R}) + i\theta$$

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

Действительная часть:

$$\varepsilon_1(\omega_0) = \varepsilon_1(\infty) + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_2(\omega) d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}$$

Мнимая часть:

$$\varepsilon_2(\omega_0) = \frac{2\omega_0}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega) d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}$$

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕЗОПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

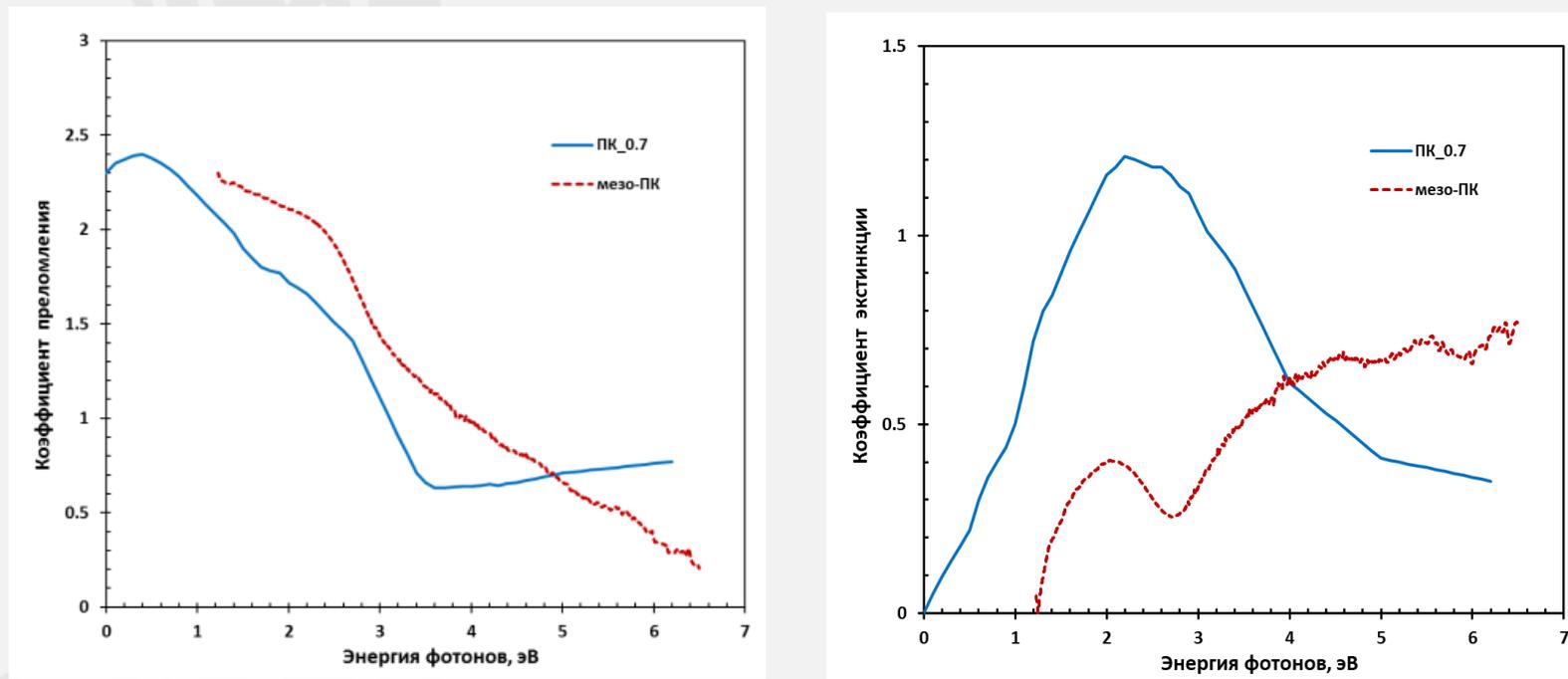
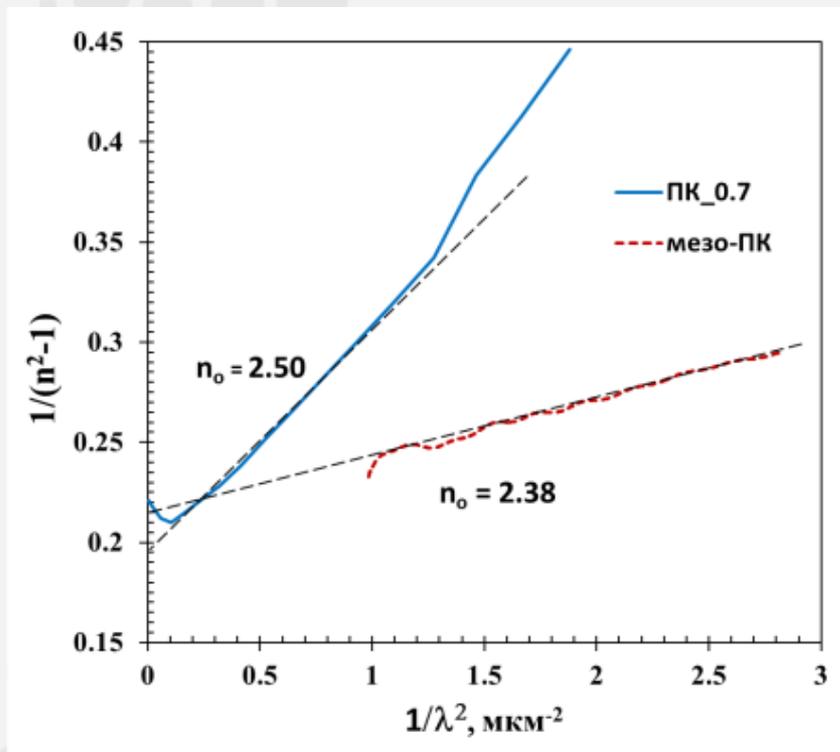


Рис. 3. Зависимости коэффициента преломления (n) (а) и коэффициента экстинкции (k) (б) слоев ПК в диапазоне энергий 0,1–6,2 эВ для образца ПК_0.7 (толщина 0.7 мкм) и мезо-ПК (толщина 5.5 мкм).

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕЗОПОРИСТОГО КРЕМНИЯ



Показатель преломления мезо-ПК:

$$n_0 = (2,38-2,50)\pm 0,02$$

Высокочастотная диэлектрическая проницаемость:

$$\epsilon_\infty = n_0^2 = 5,66 - 6,25$$

Рис.4. Спектральная зависимость величины $(n^2-1)^{-1}$ от λ^{-2} (образцы ПК_0.7 и мезо-ПК (толщина 5,5 мкм)) (в). Пунктирными линиями показаны линейные аппроксимации для расчета бездисперсионного коэффициента преломления мезо-ПК

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕЗОПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

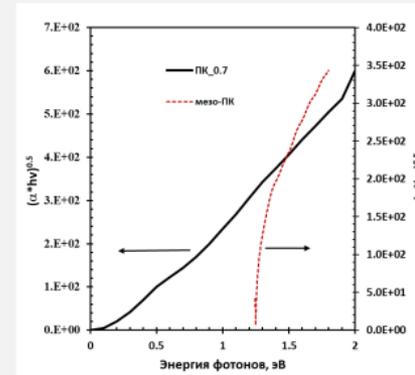
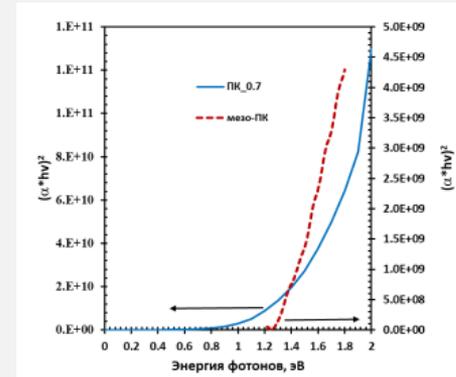
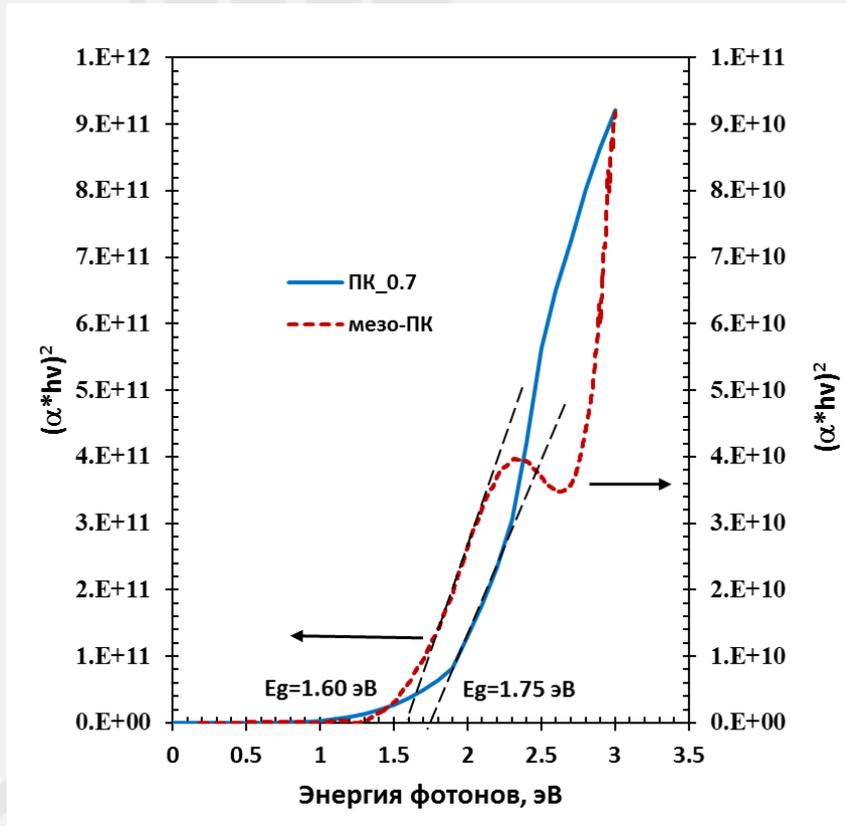


Рис. 3.8. Спектральная зависимость квадрата произведения коэффициента поглощения на энергию фотонов $(\alpha \times h\nu)^2$ – для слоя ПК_0.7 и мезо-ПК (5.5 мкм) в диапазонах энергий фотонов: 0 – 3.0 эВ (а), 0.5 – 2.0 эВ (б) и зависимости $(\alpha \times h\nu)^{0.5}$ в диапазоне энергий фотонов 0 – 2.0 эВ (в).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Проведены расчеты оптических функций мезопористого кремния (ε_1 , ε_2 , k , n , α) из данных оптической спектроскопии на отражение с использованием интегральных соотношений Крамерса–Кронига и спектров пропускания и отражения (двухслойная модель). Определены функции потерь энергии $\text{Im}(\varepsilon_1)^{-1}$ и плотности состояний $\varepsilon_2\varepsilon_0\omega^2$ в диапазоне энергий фотонов 0,1–6,2 эВ, которые отражают сложную энергетическую структуру мезопористого кремния. Показано, что расчет оптических функций из спектров отражения без учета данных в диапазоне энергий 0,1–1,6 эВ приводит к занижению значений действительной и мнимой частей диэлектрической функции мезопористого кремния.

2. Из спектральной зависимости коэффициента преломления от энергии фотонов рассчитаны величина бездисперсионного коэффициента преломления ПК: $n_o = (2,38-2,50)\pm 0,02$ и высокочастотной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_\infty = n_o^2 = 5,66 - 6,25$, что согласуется со значениями показателя преломления слоя мезо-ПК с пористостью 45–50 %: полученных из анализа интерференционных особенностей в спектрах пропускания в бездисперсионной области энергий фотонов ниже 0.8 эВ

3. Из характера поведения зависимости $(\alpha h\nu)^2$ от энергии фотонов проведена оценка ширины запрещенной зоны (E_g) мезопористого кремния в зависимости от толщины слоя: прямозонный переход с $E_g = 1,60 - 1,75$ эВ.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!