

УДК 535

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ КОНСТАНТОВ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ a -SI:H И a -NK-C:H

Наджафов Б.А.

Институт радиационных проблем НАН Азербайджана, Баку, e-mail: bnajafov@inbox.ru

В работе исследованы спектры ИК поглощения пленок сплавов a -nk-Si:H (a -аморфные, nk-нанокристаллические) в диапазоне энергии $0,03 \div 3,0$ эВ. Определены оптические коэффициенты поглощения (α) пленок для слабо и сильно поглощающих областей спектра, а также определены коэффициенты преломления (n) и коэффициенты ослабления (k_0) для различных прозрачных и не прозрачных подложек.

Ключевые слова: аморфные пленки, нанокристаллические пленки, оптические константы, поглощение, отражение.

DETERMINING THE OPTICAL CONSTANTS IN THIN FILMS a -SI:H AND a -NK-C:H

Najafov B.A.

Institute Radiation Problems of NAS Azerbaijan, Baku, e-mail:bnajafov@rambler.ru

In the work investigated IR absorbtion spectrs of the a -nk-SiH alloy films in the $0,03 \div 3,0$ eV energy range. It was identified that optical absorbtion coefficient(α) for weakly films and for strongly absorbtion aveas of spectrs. And was determined refraction index (n) and extension coefficient (k_0) for different transparancies substracts.

Keywords: amorphous films, nanocrystalline film, the optical constants of the absorbtion, reflection

В мировой науке проводилось достаточное исследование в направлении измерения и изучения тонких пленок. Однако в направлении измерения интерференции и расчета оптического поглощения не получены конкретные формулы, которые могли бы упростить результаты экспериментальных работ. В этой работе проводился краткий анализ опубликованных многочисленных статей и получены расчеты, улучшающие работы исследователей.

Пленки Si и их сплава характеризуется различными структурными фазами. Наиболее интересными из них являются кристаллическими зерна, находящиеся в аморфной матрице.

Наноразмерные эффекты тонких пленок сопровождаются образованием нанотрубок, нанопроволок, наночастиц, фуллеренов, эндофуллеренов, графитов, графанов, кластеров и др. Образование этих наноматериалов обычно связано структурными дефектами, наличием и ролью водорода в их составе. В литературе оптические свойства наноматериалов изучены недостаточно.

Поэтому измерение оптических параметров – коэффициентов поглощения (α), отражения (R), пропускания (T), преломления (n), коэффициент ослабления (k_0), толщины (d) тонких пленок и определение на их основе ширины запрещенной зоны (E_0) представляют интересным [1–15].

Используя условие сохранения энергии можно найти коэффициент поглощения α :

$$\alpha + R + T = 1.$$

Из-за многократных отражений в подложке и пленке, задача установления связи между R и T и оптическими константами не тривиальна. Обычно делается несколько упрощающих предположений для получения связи измеряемых величин R , T , α , n и k_0 . При прохождении светом границы раздела двух сред, падающий луч разбивается на отраженный и преломленный. Направление этих лучей определяется законами геометрической оптики – законами отражения и преломления. Формулы Френеля, полученные для границы раздела двух не поглощенных сред, могут быть обобщенные для случая, когда световая волна падает на границу с поглощающей средой. Из электродинамики известно, что поглощающие среды в отличие от диэлектриков характеризуются комплексным значением диэлектрической проницаемости, следовательно, и комплексным показателем преломления:

$$\tilde{n} = n - ik_0,$$

Действительная часть комплексного показателя преломления определяет скорость распространения волны в веществе, а его мнимая часть характеризует затухание волны при ее распространении в поглощающей среде и называется показателем поглощения. Величины n и k_0 определяют оптические свойства вещества и их часто называют оптическими константами данного вещества. При падении света на плоскую поверхность поглощающей среды, формулы Френеля сохраняют свой вид, с той только разницей,

что действительный показатель преломления заменяется комплексной величиной \tilde{n} .

На практике всегда имеют дело с толстой подложкой ($d_3 \gg \lambda$). В этом случае интерференционные явления не наблюдаются, поскольку измерение производится не для одной длины волны λ , а для некоторого участка спектра $\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1$, пропускаемого монохроматором.

Анализ достаточно подробных обзоров работ, в которых обсуждается формула для определения T , позволяет нам воспользоваться конкретным известным соотношением [2, 4]:

$$T = \frac{(1-R_1)(1-R_2)(1-R_3)\exp(-\alpha d)}{(1-R_2R_3)\left\{1 - \left[R_1R_2 + R_1R_3(1-R_2)^2\right]\exp(-2\alpha d)\right\}}, \quad (1)$$

Приняв здесь, что:

$$\begin{aligned} R_1 &= \left| \frac{(n-1)^2 + k_0^2}{(n+1)^2 + k_0^2} \right|; \\ R_2 &= \left| \frac{(n-n_1)^2 + k_0^2}{(n+n_1)^2 + k_0^2} \right|; \\ R_3 &= \left| \frac{(n_1-1)}{(n_1+1)} \right|^2. \end{aligned} \quad (2)$$

Тогда для слабо поглощающих областей света $k_0^2 \leq (n-1, 5)$. Отметим, что k_0 – показывает ослабление света в системе пленка-подложка, толщина пленки d , определяется в этом случае из соответствующих экстремумов пропускания или отражения из интерференционных полос.

Это уравнение хорошо согласуется с уравнением для прозрачной подложки в сильно и слабо поглощающих областях спектра. Подложка обычно выбирается NaCl, кварц, стекло, KBr, CsJ и т.д.

Здесь R_1, R_2, R_3 соответственно отражение света пленка-воздух, пленка-подложка, подложка-воздух. α – коэффициент поглощения данной пленки, d – толщина пленки, T – пропускание пленки, n – коэффициент преломления и k_0 – коэффициент ослабления света в система пленка-подложка, n_1 – коэффициенты преломления подложки.

$$\frac{(n-1)^2 + k_0^2}{(n+1)^2 + k_0^2} = R_1, \quad (3)$$

$$k_0 = \sqrt{\frac{4nn_1 - (n+n_1)^2}{1-R_2} + \frac{R_2}{1-R_2}(n+n_1)^2}. \quad (4)$$

Уравнением (4) определяется коэффициент ослабления (k_0) в пленках сплавов $a-nk$ -

Si:H. Отметим, что полученные результаты также можно использовать и для других полупроводниковых материалов в том числе GeTe, SnTe, PbTe, $a-nk$ -Si:H:B, $a-nk$ -Si:H:P, мк-Si:H, мк-Si:H:P, мк-Si:H:B, мк-Si:C:H, Si_{1-x}O_x, a-Si_{1-x}N_x:H [16]:

$$\frac{(n_1-1)^2}{(n_1+1)^2} = R_3, \quad \frac{n_1-1}{n_1+1} = \sqrt{R_3}, \quad n_1 = \frac{1+\sqrt{R_3}}{1-\sqrt{R_3}},$$

$$1 - R_3 = 1 - \frac{(n_1-1)^2}{(n_1+1)^2},$$

$$1 - R_3 = \frac{(n_1+1)^2 - (n_1-1)^2}{(n_1+1)^2} = \frac{4n_1}{(n_1+1)^2}.$$

Частные случаи:

1) $n=1$ тогда:

$$R_1 = \frac{k_0^2}{4+k_0^2}, \quad k_0^2 \ll 0,5^2,$$

$$\frac{1}{R_1} = \frac{4}{k_0^2} + 1, \quad \frac{1}{k_0^2} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{R_1} - 1 \right),$$

$$\frac{1}{k_0} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{R_1} - 1}, \quad k_0 = \frac{2\sqrt{R_1}}{\sqrt{1-R_1}}.$$

2) $n_1=1$ тогда:

$$R_1 = R_2 = \frac{(n-1)^2 + k_0^2}{(n+1)^2 + k_0^2}.$$

При $R_1 = R_2 = R$, тогда $R_3 = 0$

$$\frac{(n-1)^2 + k_0^2}{(n+1)^2 + k_0^2} = R,$$

$$k_0^2 = \frac{4n - (n+1)^2}{1-R} + \frac{R}{1+R}(n+1)^2,$$

$$k_0^2 = \frac{1}{1-R} [4n - (n+1)^2 + R(n+1)^2]. \quad (5)$$

3) если $n=1$, тогда:

$$R_2 = \frac{(1-n_1)^2 + k_0^2}{(1+n_1)^2 + k_0^2},$$

$$\frac{(n_1-1)^2 + k_0^2}{(n_1+1)^2 + k_0^2} = R_2,$$

$$k_0^2 = \frac{1}{1-R_2} [4n_1 - (n_1+1)^2 - R_2(n_1+1)^2].$$

4) если $n_1=1$, тогда $R_3 = 0$:

$$T = \frac{(1-R_1)(1-R_2) \exp(-\alpha d)}{1-R_1 R_2 \exp(-2\alpha d)}, \quad (6)$$

если $R_1 = R_2 = R$, тогда:

$$T = \frac{(1-R)^2 \exp(-\alpha d)}{1-R^2 \exp(-2\alpha d)},$$

$$T = \frac{(1-R)^2 \exp(-\alpha d)}{1 - [R \exp(-\alpha d)]^2},$$

$$T = \frac{(1-R)(1-R) \exp(-\alpha d)}{[1-R \exp(-\alpha d)][1+R \exp(-\alpha d)]},$$

$$R = \frac{(n-1)^2 + k_0^2}{(n+1)^2 + k_0^2}. \quad (7)$$

5) $n=1$ и $n_1=1$, тогда:

$$R_1 = R_2 = R = \frac{k_0^2}{4+k_0^2},$$

$$1-R = \frac{4}{4+k_0^2},$$

$$T = \frac{\left(\frac{4}{4+k_0^2}\right)^2 \exp(-\alpha d)}{1 - \left(\frac{k_0^2}{4+k_0^2}\right)^2 \exp(-2\alpha d)},$$

$$T = \frac{16 \exp(-\alpha d)}{(4+k_0^2)^2 k_0^4 \exp(-2\alpha d)},$$

$$T = \frac{16 \exp(-\alpha d)}{16 + 2k_0^2 + k_0^4 - k_0^4 \exp(-2\alpha d)},$$

или

$$T = \frac{16 \exp(-\alpha d)}{[4+k_0^2 - k_0^2 \exp(-\alpha d)][4+k_0^2 + k_0^2 \exp(-\alpha d)]},$$

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

$$T = \frac{16y}{(4+k_0^2 - k_0^2 y)(4+k_0^2 + k_0^2 y)},$$

$$T = \frac{16y}{(4+k_0^2)^2 - k_0^4 y^2},$$

$$(4+k_0^2)^2 - k_0^4 y^2 = \frac{16}{T} y,$$

$$k_0^4 y^2 + \frac{16}{T} y - (4+k_0^2)^2 = 0,$$

$$y = \frac{-\frac{8}{T} \pm \sqrt{\frac{64}{T^2} - (4+k_0^2)^2}}{k_0^4},$$

$$y = \frac{8}{Tk_0^4} \pm \frac{\sqrt{64 - (4+k_0^2)^2 T^2}}{Tk_0^4},$$

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

$$-\alpha d = \ln y, \quad \alpha d = \ln \frac{1}{y},$$

$$\alpha d = \ln \frac{Tk_0^4}{8 \pm \sqrt{64 - (4+k_0^2)^2 T^2}} k_0^2,$$

$$64 - (4+k_0^2)^2 T^2 \geq 0,$$

$$(4+k_0^2)T = 8,$$

тогда:

$$T = \frac{8}{4+k_0^2} \text{ и } \alpha d = \ln \frac{T}{8} k_0^4,$$

$$\alpha d = \ln \frac{1}{8} T k_0^4 = \ln \frac{1}{8} \frac{8}{4+k_0^2},$$

$$\alpha d = \ln \frac{k_0^4}{4+k_0^2}.$$

$$(4+k_0^2)T < 8,$$

тогда:

$$\alpha d = \ln \frac{Tk_0^4}{8 \pm \sqrt{D}}.$$

Здесь:

$$D = 64 - (4 + k_0^2)^2 T^2,$$

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{T k_0^4}{8 \pm \sqrt{D}}, \quad (8)$$

Значит коэффициенты поглощения (α) можно определить с помощью уравнения (8). А, что касается определения толщины пленок, то ее значение определяется из следующих соотношений:

$$d = \frac{\lambda_m \lambda_{m-1}}{2n(\lambda_{m-1} - \lambda_m)}. \quad (9)$$

Это уравнение используется для определения толщины пленок, если коэффициент преломления известен.

Соответственно коэффициенты преломления определяются при помощи следующего уравнения из общих кривых поглощения (α) следующим образом [2,4]:

$$\Delta n = c / 2\pi^2 \int [\alpha(v) / v^2] dv, \quad (10)$$

здесь v – частота соответствующих длин волн; c – скорость света; λ_m, λ_{m-1} – длины волны соответствующих экстремумов.

Отражение и пропускание в системе пленки и подложки слабо поглощаемых областей спектра, на не прозрачной подложке имеет вид [16–17]:

$$T = \frac{T_{23}(1 - R_3)}{1 - R_3 R_{23}}, \quad (11)$$

$$R = R_{12} + \frac{T_{23}^2 R_3}{1 - R_3 R_{23}}, \quad (12)$$

здесь T_{23} – пропускание света пленки и подложки:

$$T_{23} = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2) \exp(-\alpha d)}{1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha d)}. \quad (13)$$

Это значение показывает пропускание пленки на не прозрачной подложке. Соответственно отражение пленки на не прозрачной подложке определяется в следующем виде:

$$R_{12} = \frac{R_1 + R_2 \exp(-2\alpha d)(1 - 2R_1)}{1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha d)}, \quad (14)$$

$$R_{23} = \frac{R_2 + R_1 \exp(-2\alpha d)(1 - 2R_1)}{1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha d)}. \quad (15)$$

$$t = \frac{R_1 \exp(-2\alpha d)(1 - 2R_1)}{(1 - R_2) - (1 + R_{12})R_1 R_2}, \quad (16)$$

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \sqrt{\frac{(1 - R_2) - (1 + R_{12})R_1 R_2}{R_1}}. \quad (17)$$

В уравнении (15), проведя замену R_2 на R_1 , а также R_{12} на R_{23} и подставив в уравнение (17), получаем следующую формулу:

$$\alpha = \frac{1}{2d} \ln \frac{(1 - R_1) - (1 + R_{23})R_2 R_1}{R_2}. \quad (18)$$

Используя коэффициент пропускания из уравнения (16), находим α следующим образом. Здесь сделаем замену

$$\exp(-\alpha d) = t > 0; T_{23} = T.$$

Если $t > 0$, то:

$$\alpha = \frac{1}{2d} \ln \frac{(1 - R) - (1 + R_{23})R^2}{R}. \quad (19)$$

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{2T_{23}R^2}{\sqrt{(1 - R)^4 + 4T_{23}^2 R^2} - (1 - R)^2}. \quad (20)$$

Для аморфных, нанокристаллических ($a-nk$ -Si:H) сплавов Si:H, оптическую ширину зоны определяют из данных по поглощению, которые описывается соотношением в следующем виде:

$$(\alpha(\omega) \hbar \omega) = \text{const} (\hbar \omega - E_0)^{\frac{1}{2}}, \quad (21)$$

здесь α – коэффициент поглощения, E_0 – ширина запрещенной зоны, которая определяется из наклона зависимости $(\alpha(\omega) \hbar \omega)$ [17].

Заключение

Результаты полученные в данной работе дают возможность определить коэффициент поглощения (α), ширину запрещенной зоны (E_0), коэффициент пропускания света (T), коэффициент отражения (R), коэффициент преломления (n), и толщину пленок (d) во время и после осаждения пленок сплавов $a-nk$ -Si:H.

Данные параметры можно также определить с помощью спектрометров ИКС-21, ИКС-14А, ИКС-22, ИКС-29, Фурье-ИК, Varian 640 JR, в области энергий 0,03 ÷ 3,0 эВ и более.

Список литературы

1. Физика гидрогенизированного аморфного кремния. Под ред. Дж. Джоунпулоса, Дж. Люковски. – М.: Мир, 1988. – 447 с.
2. Наджафов Б.А., Исаков Г.И. Оптические свойства аморфных пленок твердого раствора $a\text{-Si}1-x\text{Ge}x\text{H}$ с различной концентрацией водорода // ЖПС. – 2005. – в. 72; № 3. – С. 371–376.

3. Gridorichi, Vancu A. Optical constants of amorphous silicon films near the main absorption edge // *Thin Solid Films*, 1988, v. 2, p. 105–110.
4. Brodsky M.H., Cardona M. Infrared and Raman spectra of the silicon-hydrogen bands in amorphous silicon prepared by glow discharge and sputtering // *Phys. Rev. B*, 1977, v. 16, №8, p. 3556–3571.
5. Clark A.H. Electrical and optical properties of amorphous germanium // *Phys. Rev. B*, 1967, v. 154, №3, p. 750–756.
6. Connel G.A., Temkin R.J., Paul W. Amorphous germanium. Optical properties // *Adv. phys.*, 1973, v. 22, p. 643–648.
7. Метфессель С. Тонкие пленки, изготовление и измерение / Пер. с нем. – М.: Госэнергоиздат, 1963.
8. Хевенс О.С. Измерение оптических констант тонких пленок // *Физика тонких пленок. т. 2* / Пер. с англ. – М.: Мир, 1967.
9. Мосс Т. Оптические свойства полупроводников. Пер. с англ. – М.: ИЛ, 1961.
10. Раков А.В., Потапов Е.В., Мизгириева Л.П. Влияние интерференции света в пленке двуокиси кремния на спектр отражения системы SiO₂-Si в области 9 мкм // *Оптика и спектроскопия*. – 1968. – Т. 5, вып. 1.
11. Севченко Н.А., Флоринская В.А. Спектры пропускания кварцевого стекла в области 2–24 мкм // *Оптика и спектроскопия*. – 1958. – Т. 5, вып. 1.
12. Борн М., Вольф Э. Основы оптики / Пер. с англ. – М.: Наука, 1970.
13. Петраш Г.Г. Ширина и форма инфракрасных полос поглощения // *Оптика и спектроскопия* / – 1960. – Т. 56. вып. 1.
14. Наджафов Б.А. Определение содержания водорода в аморфных пленках твердого раствора a-Si_{1-x}Cx:H оптическим методом // *ISAEЕ*. – 2007. – № 1, (29). – С. 49–54.
15. Наджафов Б.А. Аморфные и микрокристаллические полупроводники // *Сб. тр. III Межд. конф.* – СПб., 2002. – С. 38–39.
16. Tauc J. // *The optical properties of solid* (ed F. Abeles), 1970, p. 277, North-Holland, Amsterdam.
17. Tsu R., Howard W.E., Esaki Z. Optical and electrical properties and band structure of GeTe and SnTe // *Phys. Rev.* 15 August 1968, v. 172, №3, p. 779–788.