

УДК 543.422.3

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ТОНКИХ ПЛЕНОК СПЛАВОВ a -Si:H a -nk-C:H

Наджафов Б.А., Абдуллаев Х.Ш.

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

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. Определены также коэффициенты преломления (n) и ослабления (k_0) для различных прозрачных и непрозрачных подложек.

Ключевые слова: аморфные и нанокристаллические пленки, оптические коэффициенты поглощения, отражения, преломления и ослабления

SPECTROPHOTOMETRIC ANALYSIS IN THIN FILMS ALLOYS a -SI:H a -NK-C:H

Nadzhafov B.A., Abdullaev Kh.Sh.

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

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

Keywords: amorphous films, nanocrystalline film, the optical constants of the absorption, 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 статье проводились расчеты и получены результаты, улучшающие работы исследователей.

Пленки Si и их сплава характеризуется различными структурными фазами. Наиболее интересными из них являются кристаллические 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) представляются интересными [1–5].

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. Направления этих лучей определяются законами геометрической оптики – законами отражения и преломления. Однако полное описание происходящих при этом явлений требует определения интенсивности и состояния поляризации отраженного и преломленного лучей. Для плоской границы раздела двух изотропных не поглощающих сред интенсивность и состояние поляризации отраженного и преломленного лучей определяется формулами Френеля. Полученные формулы для границы раздела двух непоглощенных сред могут быть обобщены 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 вол-

ны 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].

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 системе пленка – подложка, n_1 – коэффициенты преломления подложки.

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

Здесь

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

тогда

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

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{Tk_0^4}{8 \pm \sqrt{D}},$$

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

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

Уравнением (2) определяется коэффициент ослабления (k_0) в пленках сплавов a -нк-Si:H. Отметим, что полученные результаты также можно использовать и для других полупроводниковых материалов, в том числе GeTe, SnTe, PbTe, a -нк-Si:H:B, a -нк-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 [3]:

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

тогда

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

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

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

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

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{Tk_0^4}{8 \pm \sqrt{D}}. \quad (3)$$

Значит коэффициенты поглощения (α) можно определить с помощью уравнения (3). А что касается определения толщины пленок, то ее значение определяется из следующих соотношений:

$$d = \frac{\lambda_m \lambda_{m-1}}{2n(\lambda_{m-1} - \lambda_m)}. \quad (4)$$

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]:

$$\Delta n = c / 2\pi^2 \int [\alpha(v) / v^2] dv, \quad (5)$$

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

Другим способом коэффициент поглощения (α), при слабо поглощаемых областях спектра, определяется используя формулам (1):

$$\alpha = \frac{1}{d} \frac{2m}{k \pm \sqrt{k^2 + 4mn}}, \quad (6)$$

где

$$k = (1 - R_1)(1 - R_2)(1 - R_3),$$

$$a = 1 - R_2 R_3,$$

$$b = R_1 R_2 + R_1 R_3 (1 - R_2)^3,$$

$$m = a T b,$$

$$T = \frac{kx}{a(1 - bx)},$$

$$\text{и } \exp(-\alpha d) = x = \frac{2m}{k \pm \sqrt{k^2 + 4mn}},$$

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln x. \quad (7)$$

Отражение и пропускание в системе пленки и подложки слабо поглощаемых областей спектра, на непрозрачной подложке имеет вид [1, 4]:

$$T = \frac{T_{23}(1 - R_3)}{1 - R_3 R_{23}}, \quad (8)$$

$$R = R_{12} + \frac{T_{23}^2 R_3}{1 - R_3 R_{23}}, \quad (9)$$

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

$$T_{23} = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2) \exp(-\alpha d)}{1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha d)}. \quad (10)$$

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

$$R_{12} = \frac{R_1 + R_2 \exp(-2\alpha d)(1 - 2R_1)}{1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha d)}, \quad (11)$$

$$R_{23} = \frac{R_2 + R_1 \exp(-2\alpha d)(1 - 2R_1)}{1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha d)}. \quad (12)$$

Также отметим, что из уравнения (11) коэффициенты поглощения определяются по нижеследующим формулам. Если сделаем замену $\exp(-2\alpha d) = t$, то:

$$R_{12} = \frac{R_1 + (1 - 2R_1)R_2 t}{1 - R_1 R_2 t},$$

$$(1 - R_1 R_2) R_{12} t = R_1 + (1 - 2R_1) R_2 t,$$

$$[(1 - R_1 R_2) R_{12} - (1 - 2R_1) R_2] t = R_1,$$

$$(1 - R_1 R_2 R_{12} - R_2 2R_1 R_2) t = R_1,$$

$$[(1 - R_2) - (1 + 2R_{12}) R_1 R_2] t = R_1,$$

$$t = \frac{R_1 \exp(-2\alpha d)(1 - 2R_1)}{(1 - R_2) - (1 + R_{12}) R_1 R_2}, \quad (13)$$

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

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

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

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

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

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \sqrt{\frac{(1 - R_2) - (1 + R_{12}) R_1 R_2}{R_1}}. \quad (14)$$

В уравнении (10), проведя замену R_2 на R_1 , а также R_{12} на R_{23} и подставив в уравнение (12), получаем следующую формулу:

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

Используя коэффициент пропускания из уравнения (10), находим α следующим образом. Если сделаем замену $\exp(-\alpha d) = t > 0$; $T_{23} = T$, то

$$T = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)t}{1 - R_1 R_2 t^2},$$

$$1 - R_1 R_2 t^2 = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)t}{T},$$

$$R_1 R_2 t^2 + \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)t}{T} - 1 = 0,$$

$$t^2 + \frac{1}{T} \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)t}{R_1 R_2} - \frac{1}{R_1 R_2} = 0,$$

$$t = -\frac{1}{2T} \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)}{R_1 R_2} \pm$$

$$\pm \sqrt{\left[\frac{(1 - R_1)(1 - R_2)}{2TR_1 R_2} \right]^2 + \frac{1}{R_1 R_2}}.$$

Если $t > 0$, то

$$t = -\frac{1}{2T} \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)}{R_1 R_2} +$$

$$+ \sqrt{\left[\frac{(1 - R_1)(1 - R_2)}{2TR_1 R_2} \right]^2 + \frac{1}{R_1 R_2}},$$

$$t = -\frac{1}{2T} \frac{(1-R_1)(1-R_2)}{R_1 R_2} + \frac{1}{2TR_1 R_2} \sqrt{(1-R_1)(1-R_2) + \sqrt{4T^2 R_1 R_2}},$$

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

$$\exp(-\alpha d) = \frac{\sqrt{(1-R_1)^2 (1-R_2)^2 + 4T_{23}^2 R_1 R_2} - (1-R_1)(1-R_2)}{2T_{23} R_1 R_2},$$

$$\exp(\alpha d) = \frac{2T_{23} R_1 R_2}{\sqrt{(1-R_1)^2 (1-R_2)^2 + 4T_{23}^2 R_1 R_2} - (1-R_1)(1-R_2)},$$

$$\alpha d = \ln \frac{2T_{23} R_1 R_2}{\sqrt{(1-R_1)^2 (1-R_2)^2 + 4T_{23}^2 R_1 R_2} - (1-R_1)(1-R_2)},$$

$$\alpha = \ln \frac{1}{d} \cdot \frac{2T_{23} R_1 R_2}{\sqrt{(1-R_1)^2 (1-R_2)^2 + 4T_{23}^2 R_1 R_2} - (1-R_1)(1-R_2)}. \quad (16)$$

Частные случаи:

Если $R_1 = R_2 = R$, тогда из уравнения (11):

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln x. \quad (21)$$

$$\alpha = \frac{1}{2d} \ln \frac{(1-R) - (1+R_{12})R^2}{R}. \quad (17)$$

Из уравнения (12):

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

Из уравнения (10):

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{2T_{23} R^2}{\sqrt{(1-R)^4 + 4T_{23}^2 R^2} - (1-R)^2}. \quad (19)$$

При использовании различных прозрачных подложек, которые пропускают свет в области $0,03 \div 3,0$ эВ, коэффициенты оптического поглощения определяются по следующей формуле:

$$T(\max \text{ и } \min) = \frac{(1-R)^2 \exp(-\alpha d)}{(1 \pm \xi R \exp(-2\alpha d))}, \quad (20)$$

где ξ может равняться единице, а также при толщине пленок $d = 0,01 \div 1,0$ мкм ее значение составляет $\xi = 0,3 \div 0,8$. При поглощении в области длинных волн, интерференция рассчитывается с помощью ξ . Уравнение (20) можно переписать в следующем виде:

$$x = \frac{2\xi TR^2}{\sqrt{(1-R)^4 + 4\xi T^2 R^2} + (1+R)^2},$$

Для аморфных и нанокристаллических (a -нк-Si:H) пленок Si:H, оптическую ширину зоны определяют из данных по поглощению, которые описываются соотношением в следующем виде:

$$(\alpha(\omega) \hbar\omega) = \text{const} (\hbar\omega - E_0)^{\frac{1}{2}}, \quad (22)$$

здесь α – коэффициент поглощения, E_0 – ширина запрещенной зоны, которая определяется из наклона зависимости $(\alpha(\omega) \hbar\omega)$ [5].

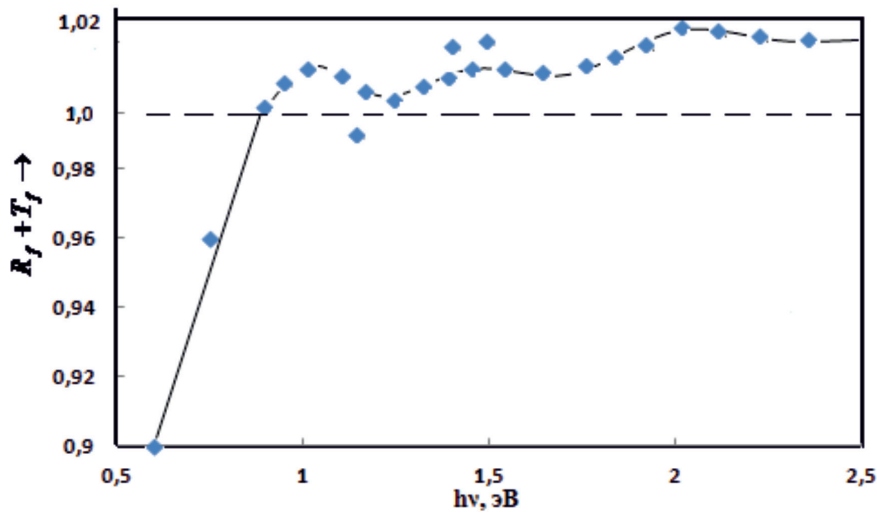
На рисунке показана зависимость изменения параметров $(R_f + T_f)$ от энергии фотона. Видно, что выше $2,0$ эВ параметры не изменяются. Основные изменения наблюдаются в области $0,5 \div 1,5$ эВ, что соответствует краю поглощения. Отметим, что для аморфных и нанокристаллических пленок сплавов Si:C: H край поглощения составляет $(1,8 \div 3,0)$ эВ. Параметры R_f и T_f можно аппроксимировать по следующей формуле:

$$xR_f + yT_f = 1. \quad (23)$$

Здесь параметры x и y соответственно модифицируются значениями α и n .

Параметр $R_f + T_f = 1$, при энергии $1,4$ эВ. Основные изменения наблюдаются при $0,6 \div 1,2$ эВ.

$$\Delta R + \Delta T / d \approx 0,005 / (1000 \text{ \AA}) = 10^3 \text{ cm}^{-1}.$$



Зависимость параметров $R_f + T_f$ от энергии фотона

Коэффициенты пропускания и отражения ($R_f + T_f$) для пленок $a\text{-Si:H}$, а также параметры, α , n , κ_0 , ζ

Длина волны	$(R_f + T_f)$	$\alpha(\text{cm}^{-1})$	n	κ_0	ζ
0,1	0,776	$1,5 \cdot 10^2$	3,70	0,67	0,30
0,3	0,832	$3 \cdot 10^2$	3,81	0,73	0,31
0,5	0,921	$5 \cdot 10^2$	3,95	0,95	0,33
0,7	0,943	$9 \cdot 10^2$	3,98	1,11	0,35
0,9	0,957	$2 \cdot 10^3$	4,01	1,23	0,41
1,1	0,983	$5 \cdot 10^3$	4,05	1,31	0,49
1,3	1,001	$6 \cdot 10^3$	4,11	1,41	0,53
1,5	1,004	$9 \cdot 10^3$	4,20	1,53	0,61
1,7	1,001	$1,2 \cdot 10^4$	4,37	1,71	0,65
1,9	1,005	$3 \cdot 10^4$	4,45	2,01	0,69
2,1	1,006	$4 \cdot 10^4$	4,59	2,21	0,71
2,3	1,004	$5,5 \cdot 10^4$	4,63	2,37	0,77
2,5	1,007	$5,7 \cdot 10^4$	4,69	2,47	0,83
2,7	1,008	$6 \cdot 10^4$	4,73	2,61	0,87
2,9	1,008	$7 \cdot 10^4$	4,75	2,71	0,90
3,1	1,009	–	–	–	0,95
3,3	1,011	$9 \cdot 10^4$	4,81	2,91	0,97
3,5	1,012	10^5	4,87	3,01	0,99

С изменением толщины плёнок от 1000 до 5000 \AA , $\Delta\alpha$ – уменьшается до 10^2 cm^{-1} . n и κ_0 уменьшаются от 5,35 до 4,15 и от 3,0 до 2,2 соответственно.

В таблице показаны коэффициенты пропускания и отражения ($R_f + T_f$) для пленок $a\text{-Si:H}$, а также параметры, α , n , κ_0 , ζ . Была выбрана кварцевая подложка.

Заключение

Результаты, полученные в данной работе, дают возможность определить коэффициенты поглощения (α), пропускания (T), отражения (R), преломления (n) и ослабления (κ_0), ширину запрещенной зоны (E_0) и толщину пленок (d) во время и после осаждения сплавов $a\text{-nk-Si:H}$.

Данные параметры можно также определить с помощью спектрометров ИКС-22, ИКС-29, Specord 75 IR, Фурье-ИК (Varian 640 JR) в области энергий $0,03 \div 3,0$ эВ и более.

Список литературы

1. Физика гидрогенизированного аморфного кремния. Под ред. Дж. Джоунпулоса, Дж. Люковски. – М.: Мир, 1988. – вып. 2. – 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 различ-

ной концентрацией водорода. // ЖПС. – 2005. – v. 72. № 3. – С. 371–376.

3. Tsu R., Howard W.E., and Esaki Z. Optical and electrical properties and band structure of GeTe and SnTe. Phys. Rev. 15 August 1968. – v. 172, № 3. – P. 779–788.

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. Наджафов Б.А. Оптические свойства тонких пленок $\alpha\text{-Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:H}$ ($x = 0 \div 1$) // International journal of applied and fundamental research, 2017. – № 1. – P. 20–26.