

ОПТИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ И ПАРАМЕТРЫ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ТОНКИХ СЛОЕВ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ В ДИАПАЗОНЕ ЭНЕРГИЙ 0,1–6,2 эВ

Д. Т. Ян¹

¹Дальневосточный государственный университет путей сообщения, Хабаровск, Россия

dmitry_yan@mail.ru

Проведено исследование оптических свойств слоев пористого кремния, полученного на кристаллическом кремнии р-типа (100) методом анодного травления. Из оптических спектров на пропускание и отражение проведена оценка основных оптических характеристик пористого кремния. Установлено, что явление видимой фотолюминесценции пористого кремния обусловлено изменением параметров зонной структуры.

Ключевые слова: пористый кремний, фотолюминесценция, рекомбинация.

1. Введение

В настоящее время кремний широко применяется для создания полупроводниковых приборов и устройств. Известно, что кремний является непрямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 1,1 эВ [1]. Вследствие низкой эффективности излучательных переходов в собственном полупроводнике, создание на его основе оптоэлектронных приборов является маловероятным.

Известно, что в результате анодного травления при малых плотностях тока (менее 20 мА/см²) на поверхности кристаллического кремния образуется массив кремниевых кристаллитов с размерами менее 10 нм – нанокристаллитов, разделенных порами [9]. Явление видимой фотолюминесценции (ФЛ) на поверхности пористого кремния (ПК) при комнатной температуре обусловлено высокой интенсивностью излучательной рекомбинации [2]. Это указывает на изменение фундаментальных параметров в образующемся материале: типа перехода и ширины запрещенной зоны [3, 4].

Целью представленной работы является определение оптических характеристик пористого кремния и параметров его электронной структуры. В статье рассмотрены оптические функции тонких слоев ПК на Si (100), рассчитанные из данных оптической спектроскопии на пропускание и отражение. Данные из литературы о характере фундаментального перехода и энергетических положениях межзонных переходов в пористом кремнии отличаются друг от друга. Согласно теоретическим расчетам ширина запрещенной зоны нанокристаллитов ПК имеет величину 2.0-2.5 эВ.

Тонкие слои пористого кремния толщиной 0.5-2.1 мкм были получены методом анодного травления на пластинах монокристаллического кремния р-типа (100), легированного бором с удельным сопротивлением 10 Ом · см.

Для получения омического контакта кремниевой пластины с электродом на тыльную сторону пластины был нанесен слой алюминия при температуре 450°С. Процесс анодного травления проводился в спиртовом растворе плавиковой кислоты при равном соотношении реагентов. Плотность тока в течение процесса составила 10 мА/см², процесс проводили в течение 6 мин. После окончания анодного травления образцы промывались в деионизованной воде [5, 6].

Спектры ИК-поглощения были сняты при комнатной температуре на Фурье ИК-спектрометре Bruker IFS-113v с разрешением 8 см^{-1} и усреднением по 600 сканам. Для получения ИК-спектров было проведено удаление слоя Al с тыльной стороны пластины.

2. Результаты и обсуждение

Для вычисления оптических функций в области прозрачности была использована двухслойная модель, в которой учитывались многократные внутренние отражения и поглощение в пленке ПК и подложке [7]. Основные оптические функции монокристаллического кремния были взяты из литературы [8]. На основе данного метода были рассчитаны: коэффициент поглощения (α), показатель преломления (n), коэффициент экстинкции (k), действительная (ε_1) и мнимая (ε_2) части диэлектрической функции.

Методами оптической спектроскопии на пропускание и отражение в диапазоне энергий фотонов 0.1-1.24 эВ исследованы тонкие слои пористого кремния на Si(100).

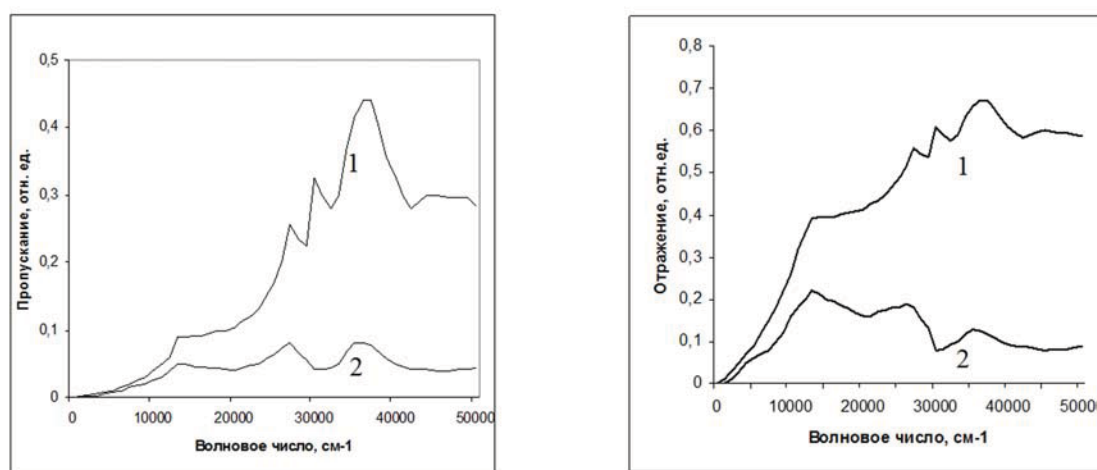


Рис. 1. Спектры ИК пропускания (слева) и отражения (справа) образцов кристаллического (1) и пористого кремния (2) в диапазоне энергий 0,1–6,2 эВ

На рис. 1 приведены оптические спектры на пропускание и отражение кристаллического кремния р-типа (100) и пористого кремния.

Расчеты спектральных зависимостей коэффициента поглощения показали, что выращенные тонкие слои ПК имеют полупроводниковый характер поглощения и являются прямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 1.85-2.0 эВ. Отсутствие дисперсии коэффициента преломления означает, что межзонный переход с энергией 1.85-2.0 эВ действительно определяет край фундаментального поглощения в тонких слоях ПК на Si(100). Экстраполяция линейной части зависимости $1/(n^2-1)$ к величине λ^{-2} в соответствии с моделью Друде для диэлектрической функции (рис. 2) позволяет вычислить величину $n_0=2.2\pm 0.02$ для тонких слоев ПК [9]. Анализ спектров оптической проводимости показал, что приведенная плотность состояний в тонких слоях пористого кремния имеет небольшое значение в области фундаментального перехода и значительно возрастает в диапазоне энергий 3.2–3.5 эВ. На рис. 3 приведен спектр диэлектрической функции пористого кремния, рассчитанный на основе данных оптической спектроскопии с использованием интегральных соотношений Крамерса-Кронига.

Определены функции потерь энергии $\text{Im}(\varepsilon_1)^{-1}$ и плотности состояний $\varepsilon_2\varepsilon_0\omega^2$ (рис. 4), которые отражают сложную энергетическую структуру пористого кремния.

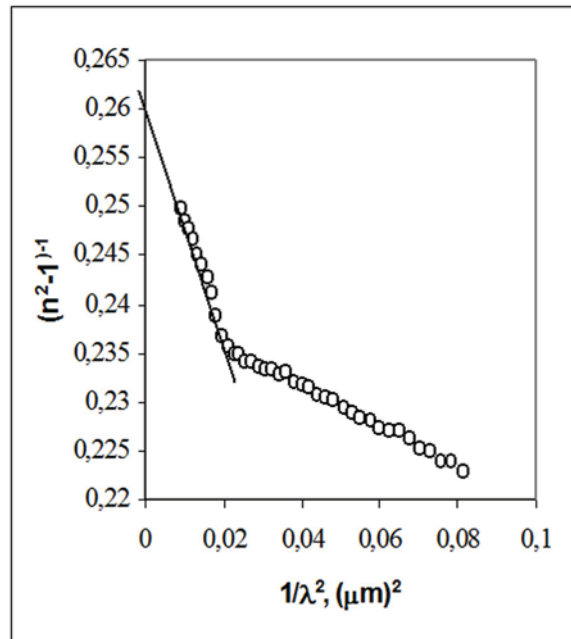


Рис. 2. Спектральная зависимость величины $(n^2 - 1)^{-1}$ от λ^{-2} . Пунктирной линией показана линейная аппроксимация зависимости для расчет бездисперсионного коэффициента преломления пористого кремния

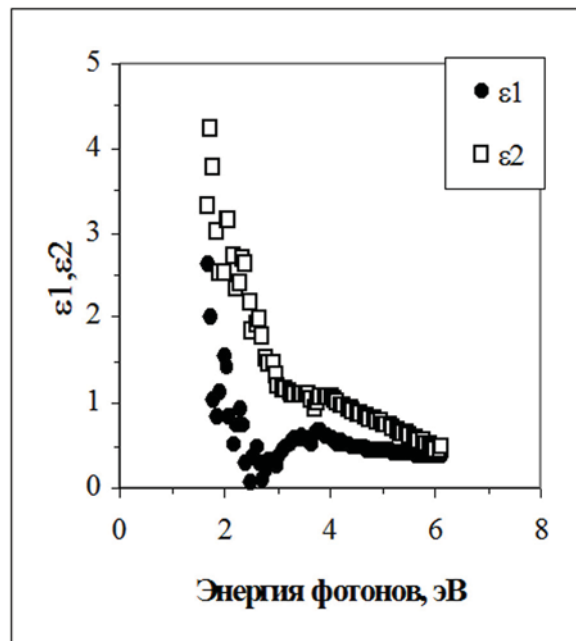


Рис. 3. Действительная и мнимая части диэлектрической функции пористого кремния в диапазоне энергий 1.6–6.2 эВ

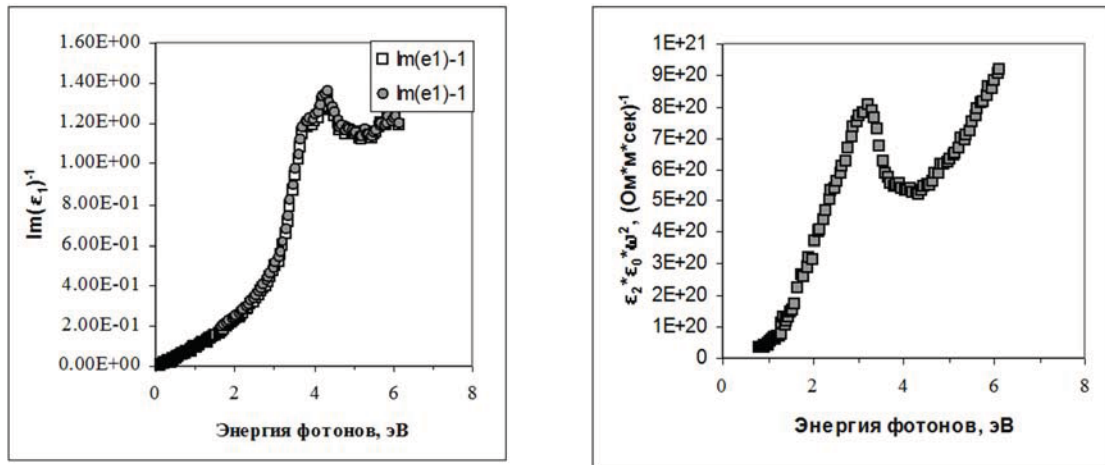


РИС. 4. Спектральная зависимости потерь энергии (слева) и плотности состояний (справа) в тонких слоях пористого кремния для тонких слоев пористого кремния в диапазоне энергий 0.1–6.2 эВ

Функция потерь энергии $\text{Im}(\epsilon_1)^{-1}$ (рис. 4, слева) дает дополнительную информацию о распределении потерь энергии заряженными носителями. В тонких слоях пористого кремния эти потери относятся к носителям заряда – дыркам. Наблюдается почти линейный рост энергетических потерь в диапазоне энергий от нуля до 1.9 эВ. Начиная с энергии 2 эВ, линейный характер зависимости сохраняется, при этом увеличивается угол ее наклона. В диапазоне энергий 3.3–4.3 эВ величина потерь энергии, проявляет рост, близкий к экспоненциальному, достигает максимума при 4.3 эВ. Максимум потерь энергии соответствует максимуму потерь энергии дырками в слое ПК. Затем величина потерь уменьшается незначительно и слабо растет до 6.2 эВ. Такой характер потерь энергии дырками соответствует сложной структуре плотности состояний в зоне проводимости пористого кремния.

Для классических полупроводников известно, что в условиях сохранения квадрата модуля матричного элемента переходов и параболичности дисперсии энергетических зон произведение оптической проводимости ($\sigma_{\text{опт}}$) на частоту (ω) пропорционально функции плотности состояний $G(\omega)$ в энергетических зонах [10–12]:

$$\sigma_{\text{опт}}(\omega) \cdot \omega = 2n_1 k_1 \epsilon_0 \omega^2 = \epsilon_2 \epsilon_0 \omega^2 \sim G(\omega)$$

Используем данный метод оценки для расчета плотности состояний в пористом кремнии, предполагая, что параболичность энергетических зон в нем сохраняется. Такая спектральная зависимость представлена на рис. 4, справа. Рассчитанная зависимость имеет вид, аналогичный зависимости потерь энергии (рис. 4, слева), но максимум плотности состояний смещен в сторону меньших энергий. В диапазоне энергий (0.68–1.21 эВ) величина плотности состояний растет слабо, однако, с ростом энергии обнаруживает линейный рост и достигает максимума при 3.2 эВ, что соответствует максимуму поглощения в слое пористого кремния. При энергии более 3.3 эВ величина плотности состояний снижается вплоть до 4.3 эВ, а затем растет с увеличением энергии фотонов.

Характер спектральных зависимостей потерь энергии и плотности состояний в пористом кремнии показывает, что при малых энергиях плотность состояний и вероятность межзонных переходов малы, а сильное поглощение в этой структуре происходит при энергиях, превышающих 2.0 эВ. Наличие области слабого поглощения соответствует как присутствию некоторого количества столбов повышенных размеров в структуре слоя пористого кремния (по теории квантового ограничения, так и наличию внутризонных переходов

в столбах различных размеров, связанных с дефектами на границе с окислом и внутри кристаллитов [13–15].

Литература

- [1] Иоффе А.Ф. Физика полупроводников. М.: Изд-во АН СССР, 1957. 490 с.
- [2] Canham L.T. Visible photoluminescence of porous Si // *Appl. Phys. Lett.*, 1990, 57, P. 1046–1049.
- [3] Sawada S., Hamada N., Ookubo N. Mechanism of visible photoluminescence of porous silicon // *Phys.Rev. B.*, 1994, 49, № 8, P. 5236–5245.
- [4] Dimova-Malinovska D., Sendova-Vasileva, Marinova T., Krastev V., Kamenova M., Tzenov N. Correlation between the photoluminescence and chemical bonding in porous silicon // *Thin Solid Films*, 1996, 276, P. 290–292.
- [5] Uhlir A. Formation of porous silicon // *Bell Syst. Tech.*, 1956, 35, P. 333–336.
- [6] Theib W. Optical properties of porous silicon // *Surf. Sci. Rep.*, 1997, 29, № 5, P. 92–192.
- [7] Уханов Ю.А. Оптические свойства полупроводников. М.: Наука. 1997, 252 с.
- [8] Орешкин П.Т. Физика полупроводников и диэлектриков. М.: Высш. школа, 1977, 448 с.
- [9] Горбачев В.В., Спицина Л.Г. Физика полупроводников и металлов. М.: Metallurgia, 1976. 368 с.
- [10] Cantin J. L. et al. Anodic oxidation of p^- and p^+ - type porous silicon // *Thin Solid Films*, 1996, 276, № 3, P.76–79.
- [11] Belmont O. et al. About the origin and the mechanisms involved in the cracking of highly porous silicon layers under capillary stresses // *Thin Solid Films*, 1996, 276, № 3, P. 219–222.
- [12] Горячев Д.Н., Беляков Л.В., Сресели О.М. О механизме образования пористого кремния // *Физ. и техн. полупроводн.*, 2000, 34, Вып. 5, С. 1130-1134.
- [13] Petrova-Koch V., Muschik T. The relation between the visible and the infrared luminescence bands in porous silicon // *Thin Solid Films*, 1995, 255, № 5, P. 246-249.
- [14] Кашкаров П.К., Константинова Е.А., С. А. Петрова, Тимошенко В.Ю. Юнович А.Э. К вопросу о температурной зависимости фотолюминесценции пористого кремния // *Физ. и техн. полупроводн.*, 1997, Т. 31, Вып. 6, С. 745–748.
- [15] Ян Д.Т. Влияние лазерного возбуждения на фотолюминесценцию анодно окисленного пористого кремния // *Опт. журнал*, 2010, 77, № 8, С. 67–71.