

PACS 78.66-w, 81-15 Cd

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ В ПЛЕНКАХ a -Si:H a -nk-C:H

Б.А. Наджафов

Институт Радиационных Проблем НАНА
bnajafov@inbox.ru

Резюме: В работе исследованы спектры ИК поглощения пленках a -Si:H a -nk-C:H (a -аморфные, nk-нано кристаллические) в диапазоне энергии 0,03 ÷ 3,0 эВ. Определены оптические коэффициенты поглощения (α) пленок для слабо и сильно поглощающих областей спектра, а также коэффициенты преломления (n) и коэффициенты ослабления (k_0) для различных прозрачных и не прозрачных подложек.

Ключевые слова: аморфные пленки, нано кристаллические пленки, оптические константы, поглощение, отражение.

1. Введение

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.

Нано размерные эффекты тонких пленок сопровождаются образованием нано трубок, нано проволок, нано частиц, фуллеренов, эндо фуллеренов, графитов, графинов, квантовая точка, квантовая яма, кластеров и др. Образование этих нано материалов обычно связано структурными дефектами, наличием и ролью водорода в их составе. В литературе оптические свойства нано материалов 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 [1-5].

2. Теоретическая и экспериментальная часть

При определении оптических констант, коэффициентов поглощения (α) и преломления (n), ослабления (k_0) измеряется величина пропускания T , отражения R [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 определяется 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. 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 оптические 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 [1-3]:

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

Приняв здесь, что:

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

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

Толщина пленки d , определяется в этом случае из соответствующих экстремумов пропускания или отражения из интерференционных полос.

$(4 + k_0^2)T < 8$, тогда:

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

Здесь:

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

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

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

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

λ_m, λ_{m-1} – длины волны соответствующих экстремумов. Это уравнение используется для определения толщины пленок, если коэффициент преломления известен [1,3].

Соответственно коэффициенты преломления определяются при помощи следующего уравнения:

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

здесь ν - частота соответствующих длин волн. c -скорость света.

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 областях спектра, на не прозрачной подложке имеет вид [4,5]:

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

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

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

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

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

$$R_{12} = \frac{R_1 + R_2 \exp(-2\alpha d)(1 - 2R_1)}{1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha d)}, \quad (10)$$

$$R_{23} = \frac{R_2 + R_1 \exp(-2\alpha d)(1 - 2R_1)}{1 - R_1 R_2 \exp(-2\alpha d)}. \quad (11)$$

Это соотношение показывает отражение пленок и подложки. Здесь R_1, R_2, R_3 соответственно показывает отражение воздух-плёнок, пленка-подложка и воздух-подложка. Толщина d и поглощения α определяется с соответствующих интерференционных полос. αd - аппроксимируется с помощью T при условии, если $R_3 = 0, R_2 = R_1 = R$ то:

$$T = (1 - R)^2 \exp(-\alpha d) / 1 - R^2 \exp(-2\alpha d), \quad (12)$$

Здесь

$$p = \frac{(1 - R)^2}{T}; \alpha = \frac{1}{d} \ln \left[\frac{1}{2} \left(\sqrt{p^2 + 4R^2} + p \right) \right]. \quad (13)$$

Также отметим, что из уравнения (10) коэффициенты поглощения определяются по нижеследующим формулам. Если сделаем замену $\exp(-2\alpha d) = t$, то:

$$\begin{aligned}
 R_{12} &= \frac{R_1 + (1 - 2R_1)R_2 t}{1 - R_1 R_2 t} \\
 (1 - R_1 R_2)R_{12} t &= R_1 + (1 - 2R_1)R_2 t, \\
 [(1 - R_1 R_2)R_{12} - (1 - 2R_1)R_2] t &= R_1, \\
 (1 - R_1 R_2 R_{12} - R_2 2R_1 R_2) t &= R_1, \\
 [(1 - R_2) - (1 + 2R_{12})R_1 R_2] t &= R_1, \\
 t &= \frac{R_1 \exp(-2\alpha d)(1 - 2R_1)}{(1 - R_2) - (1 + R_{12})R_1 R_2}, \tag{14}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \exp(-2\alpha d) &= \frac{R_1}{(1 - R_2) - (1 + R_{12})R_1 R_2}, \\
 \frac{1}{\exp(2\alpha d)} &= \frac{R_1}{(1 - R_2) - (1 + R_{12})R_1 R_2}, \\
 \exp(2\alpha d) &= \frac{(1 - R_2) - (1 + R_{12})R_1 R_2}{R_1}, \\
 \exp(\alpha d) &= \sqrt{\frac{(1 - R_2) - (1 + R_{12})R_1 R_2}{R_1}}, \\
 \alpha d &= \ln \sqrt{\frac{(1 - R_2) - (1 + R_{12})R_1 R_2}{R_1}}, \\
 \alpha &= \frac{1}{d} \ln \sqrt{\frac{(1 - R_2) - (1 + R_{12})R_1 R_2}{R_1}}.
 \end{aligned}$$

Из этого уравнения проводим замену R_2 на R_1 , а также R_{12} на R_{23} и подставив в уравнение (14) получаем следующую формулу:

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

Используя коэффициент пропускания $T_{2,3}$ находим α следующим образом. Если здесь сделаем замену $\exp(-\alpha d) = t > 0$; $T_{23} = T$, то:

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

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

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

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

Если $t > 0$, то:

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

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

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

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

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

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

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

Частные случаи:

Если $R_1 = R_2 = R$, тогда из уравнения (15):

$$\alpha = \frac{1}{2d} \ln \frac{(1-R) - (1+R_{12})R^2}{R}. \quad (16)$$

Из уравнения (16):

$$\alpha = \frac{1}{2d} \ln \frac{(1-R) - (1+R_{23})R^2}{R}. \quad (17)$$

и

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{2T_{23} R^2}{\sqrt{(1-R)^4 + 4T_{23}^2 R^2} - (1-R)^2}. \quad (18)$$

Для аморфных, нано кристаллических (a -Si:H a -nk-C:H) пленок оптическую

ширину зоны определяют из данных по поглощению, которые описывается в следующем виде:

$$(\alpha(\omega)\hbar\omega) = \text{const}(\hbar\omega - E_0)^{\frac{1}{2}}, \quad (19)$$

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

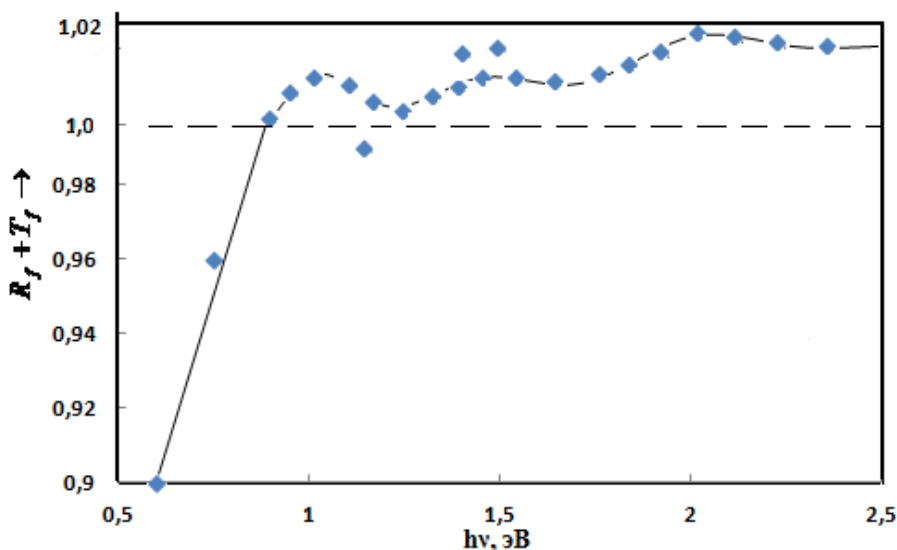


Рис. Спектрофотометрический анализ в пленках сплавов a -Si:H и a -nk-C:H

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

$$xR_f + yT_f = 1. \quad (20)$$

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÷1,2 эВ. $\Delta R + \Delta T / d \approx 0,005 / (1000 \text{ \AA}) = 10^3 \text{ cm}^{-1}$. С изменением толщины 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 1 показаны коэффициенты пропускания и отражения $(R_f + T_f)$ для пленок a -Si:H и a -nk-C:H, а также параметры α , n , κ_0 , ζ . При поглощении в области длины волн интерференция рассчитывается с помощью (длины волны λ_m и λ_{m-1} соответствующих экстремумов) ζ и для получения более точных данных используются с изменением толщины пленок. Была выбрана кварцевая подложка.

Таблица

Спектрофотометрический анализ в пленках сплавов a -Si:H a -нк-C:H

Длина волны	$(R_f + T_f)$	$\alpha(\text{cm}^{-1})$	n	k_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

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, $\text{Si}_{1-x}\text{O}_x$, a - $\text{Si}_{1-x}\text{N}_x$:H [16]:

3. 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 -Si:H a -нк-C: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.

Литература

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 - $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$:H с различной концентрацией водорода. // ЖПС. 2005. v. 72. № 3. с. 371-376.
3. G.A. Connel and A.Lewis. Comment on the evidence for sharp and gradual optical absorption edges in amorphous germanium. //J. Phys.Stat.Sol.(b) 60, 291, (1973).
4. Najafov B.A. Determining the amount of hydrogen in thin films well a - $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$:H ($x=0\div 1$) for elec tronic devices/ // Journal of Material Sciences & Engineering, 2016, v.5, issue 6, p.71-76

5. Наджафов Б.А. Оптические свойства тонких пленок $a\text{-Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:H}$ ($x=0\div 1$). // International Journal of Applied and fundamental research, 2017, №1, p.20-26

SPECTROPHOTOMETRIC ANALYSIS IN FILMS $a\text{-Si:H}$ $a\text{-nk-C:H}$

B.A. Najafov

Abstract: In this work, the IR absorption spectra of films in the energy range of 0.03–3.0 eV are investigated. Optical absorption coefficients of films for weakly and strongly absorbing regions of the spectrum, as well as refractive indices (n) and attenuation coefficients for various transparent and non-transparent substrates.

Key words: amorphous films, nano-crystalline films, optical constants, absorption, reflection.

$a\text{-Si:H}$ $a\text{-nk-C:H}$ TƏBƏQƏLƏRİNİN SPEKTROMETRİK ANALİZİ

B.A. Nəcəfov

Xülasə: İşdə 0,03 ÷ 3,0 eV i enerjinin intervalında $a\text{-Si:H}$ $a\text{-nk-C:H}$ təbəqələrin İQ spektri tədqiq olunmuşdur. Nazik təbəqələrin zəif və güclü udulma oblastında optik udulma sabiti (α), həmçinin sındırma əmsalı (n) və zəifləmə əmsalı (κ_0) təyin edilmişdir.

Açar sözlər: amorf təbəqə, nano-kristal təbəqə, optik sabitlər, absorbsiya, əks.