

06:07

Исследование прямых оптических переходов в монокристаллах кремния по спектрам пропускания

© И.С. Панкратов, Р.П. Сейсян, А.А. Шорохов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
E-mail: vano85@bk.ru

Поступило в Редакцию 5 марта 2012 г.

Экспериментально получен спектр пропускания монокристаллического Si в области 2.75–3.25 eV. Предложена эмпирическая формула, описывающая спектральную зависимость оптической плотности. Определена энергия прямого перехода в седловой точке $E(\Gamma_{15}) - E(\Gamma_{25'}) = 3.43$ eV. Анализом спектральной зависимости показано, что наблюдаемое поглощение соответствует прямым переходам в сингулярность Ван Хова зоны проводимости M_1 .

Как известно, кремний является основным материалом микроэлектроники, в частности вычислительной техники. С ростом производительности современных компьютеров встает проблема быстрой передачи информации даже в пределах одной микросхемы. Эта проблема может быть решена с развитием кремниевой фотоники. Необходимость интеграции транзисторов и элементов фотоники в одном кристалле требует создания оптоэлектронных приборов на основе кремния. Одним из направлений создания высокоэффективных источников излучения на основе кремния является разработка и исследование структур с размерным квантованием [1]. Так, фотолюминесценция и усиление света [2–4], а также электролюминесценция [5,6] обнаружены в кремниевых нанокристаллах, расположенных в матрице из SiO₂.

Для расчета энергетических уровней нанокристаллов необходимы параметры зоны проводимости в Γ -точке объемного монокристаллического кремния. Однако получение точных экспериментальных данных затруднено высоким значением коэффициента поглощения $\sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$ в области прямых оптических переходов. При исследовании спектров пропускания это приводит к проблеме изготовления достаточно тонких образцов.

Альтернативой эксперименту с пропусканием света является измерение спектров отражения. Так, с помощью соотношений Крамера–Кронинга в работе [7] по спектрам пропускания были найдены оптические константы n и k , а также коэффициент поглощения α кремния. Аналогичным образом в работе [8] была получена спектральная зависимость диэлектрической проницаемости. Однако этот метод является скорее косвенным, поэтому исследование более информативных спектров пропускания представляет большой интерес. В работах [9,10] коэффициент поглощения α был измерен по спектрам пропускания тонких эпитаксиальных пленок кремния, выращенных на шпинели [9] и на сапфире [10] вплоть до 3.8 eV, т.е. существенно ниже предполагаемого края поглощения при прямых переходах в минимум зоны проводимости E_0 (сингулярность Ван Хофа M_0).

Целью данной работы было исследование спектров пропускания объемного монокристаллического кремния. Для эксперимента использовались образцы высокоомного кремния с ориентацией $\langle 100 \rangle$. Анизотропным травлением на пластине были выполнены лунки диаметром около 1 mm. Дно таких лунок образовывало мембрану, которая уже после разделения пластины на отдельные образцы утончалась в 20%-м водном растворе КОН с добавлением изопропилового спирта. Измерение толщины образцов контролировалось по спектрам пропускания, для чего использовалась экспериментальная установка, схематично изображенная на вставке рис. 1. В качестве источника света большой яркости, необходимой для работы с образцами высокой оптической плотности, была использована мощная ксеноновая лампа. Для предотвращения перегрева образца была выбрана обратная оптическая схема — свет от лампы, пройдя через монохроматор, фокусировался на образец и затем на катод фотоэлектронного умножителя. Регистрация фототока производилась в линейном режиме методом синхронного детектирования.

Полученный в ходе эксперимента сигнал содержит аппаратную функцию всей системы, поэтому смысл имеет только отношение сиг-

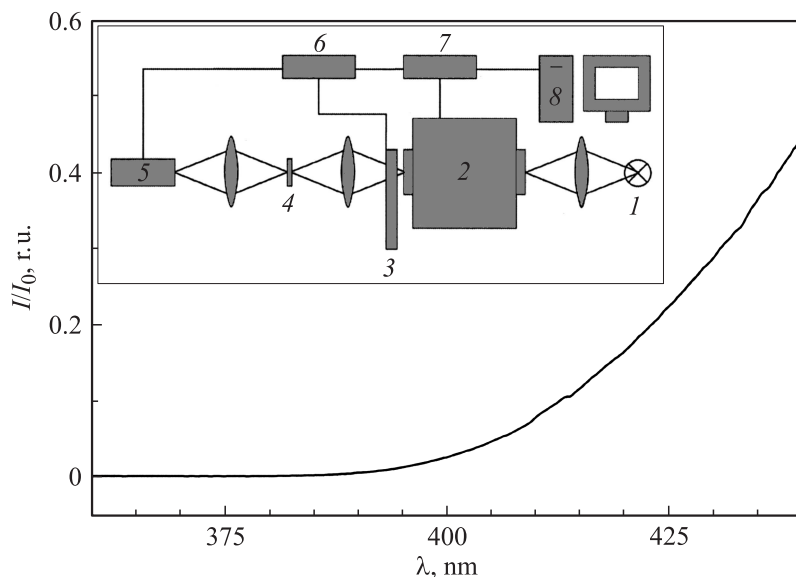


Рис. 1. Измеренный спектр пропускания образца. На вставке — схема экспериментальной установки: 1 — лампа ДКсШ-500, 2 — монохроматор МДР-23, 3 — оптический модулятор, 4 — образец Si, 5 — фотоумножитель ФЭУ-100, 6 — селективный нановольтметр, 7 — контроллер, 8 — ЭВМ.

нала с образцом к сигналу без образца, представляющее собой спектр пропускания (рис. 1). Заметим также, что мембрана образца имела большую неоднородность по толщине. В таком случае можно говорить лишь о некоторой эффективной площади, участвующей в пропускании света. Эта площадь, грубо говоря, равна площади самых тонких участков. Таким образом, правильное измерение интенсивности падающего света I_0 становится невозможным, и коэффициент пропускания I/I_0 может быть определен лишь с точностью до некоторого постоянного множителя.

Коэффициент поглощения, обусловленный межзонными переходами, в дипольном приближении можно записать как:

$$\alpha = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar}{ncm^2} |P_{cv}|^2 \frac{1}{E} \rho(E), \quad (1)$$

где e , m — заряд и масса электрона, n — коэффициент преломления среды, $E = \hbar\omega$ — энергия фотона поглощаемого света, $|P_{cv}|^2$ — квадрат матричного элемента дипольного перехода, $\rho(E)$ — комбинированная плотность состояния [11]. Квадрат матричного элемента слабо зависит от энергии, поэтому зависимость коэффициента поглощения обусловлена главным образом множителем $\rho(E)/E$.

В кремнии Γ -точка зоны проводимости считается точкой сингулярности Ван Хофа M_1 . Вблизи нее $\rho(E)$ ведет себя как [11]:

$$\rho(E) = \begin{cases} C_1 - \sqrt{E_1 - E}, & E < E_1 \\ C_1, & E > E_1, \end{cases} \quad (2)$$

где $E_1 = E(\Gamma_{15}) - E(\Gamma_{25'})$, C_1 — константа.

Для интенсивности прошедшего света имеем

$$I = (1 - R)^2 I_0 \exp(-\alpha d). \quad (3)$$

Здесь d — толщина образца, R — коэффициент отражения (приближенно будем считать R и n постоянными), а множитель $(1 - R)^2$ учитывает однократное отражение света от границ образца. С учетом неточности измерения I_0 из (3) имеем

$$\alpha d = \ln\left(\frac{I'_0 \cdot C}{I}\right) + \ln(1 - R)^2 = \ln\left(\frac{I'_0}{I}\right) - \ln(C) + \ln(1 - R)^2.$$

Здесь $I'_0 = I_0/C$ — измеренная интенсивность падающего света, C — постоянный множитель. Обозначив $D' = \ln(I'_0/I)$, $C_2 = \ln(C) - \ln(1 - R)^2$, имеем

$$D' = \alpha d + C_2. \quad (4)$$

Таким образом, полученная экспериментально оптическая плотность D' отличается от настоящей на константу C_2 . Подставляя α из (1) в (4) и используя $\rho(E)$ из (2), можем ввести эмпирическую формулу, аппроксимирующую D' при $E < E_1$:

$$D_{approx}(E) = A \frac{C_1 - \sqrt{E_1 - E}}{E} d + C_2, \quad (5)$$

где

$$A = \frac{4\pi^2 e^2}{ncm^2} |P_{cv}|^2.$$

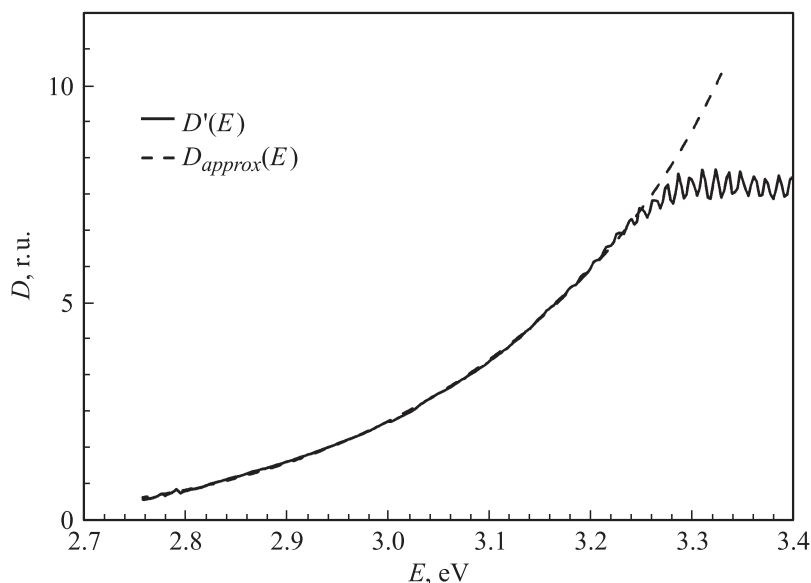


Рис. 2. Экспериментальная оптическая плотность $D'(E)$ и аппроксимирующая функция $D_{approx}(E)$ из (5).

Мы можем рассматривать C_1 , d , C_2 и E_1 как параметры, которые могут быть найдены в результате подгонки D_{approx} к D' . На рис. 2 приведены экспериментальная кривая D' и подгонная к ней D_{approx} . Видно, что D_{approx} достаточно точно совпадает с D' вплоть до 3.25 eV. Отклонение D' при больших энергиях связано с ошибкой, вызванной низким уровнем сигнала, т. е. сильное поглощение света вблизи прямых переходов при доступной нам толщине образцов не дает возможности регистрировать спектры пропускания вплоть до самой E_1 . Однако оказывается возможным определить E_1 по доступному нам участку до 3.25 eV. Действительно, полученная в результате подгонки $E_1 = 2.43$ eV достаточно точно совпадает с приведенными в [12] теоретическими 3.42–3.50 eV и экспериментальными 3.36–3.42 eV значениями энергии прямого перехода $\Gamma_{25'} \rightarrow \Gamma_{15}$ в кремнии.

Так же для наглядности можно из (5) выразить

$$E_1 - E = \left(C_1 - \frac{E}{A} (D_{approx}(E) - C_2) \right)^2. \quad (6)$$

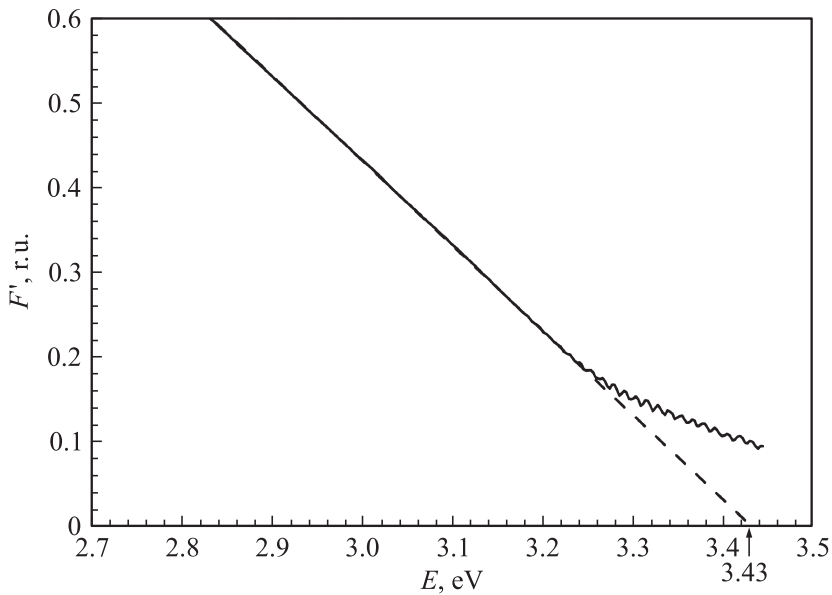


Рис. 3. Функция $F'(E)$ и аппроксимирующая прямая.

В правую часть (6) подставим D' вместо D_{approx} и обозначим полученное выражение как $F'(E)$. Очевидно, аппроксимацией для $F'(E)$ будет являться прямая линия $E_1 - E$. Функция $F'(E)$ приведена на рис. 3. На участке до 3.25 eV она действительно представляет собой прямую линию, продолжение которой пересекает ось E в точке 3.4 eV.

Таким образом, прямое измерение спектров пропускания подтверждает наличие сингулярности Ван Хова M_1 в Γ -точке зоны проводимости при 3.43 eV. Полученная кривая хорошо совпадает с экспериментом, что дает возможность определять энергию прямых переходов E_1 по спектрам пропускания даже при отсутствии данных о толщине образца. Вопрос о расчете настоящего коэффициента поглощения и о положении $E_0 = E_g$ для прямых переходов в минимум зоны проводимости остается открытым и представляет большой интерес для сравнения с результатами [9] и известными теоретическими расчетами.

Список литературы

- [1] *Bahrm Jalali, Sasan Fathpour* // J. Lightwave Technology. 2006. V. 24. N 12. P. 4600.
- [2] *Pavesi L., Dal Negro L., Mazzoleni C., Franz`o G., Priolo F.* // Nature. 2000. V. 408. N 6811. P. 440.
- [3] *Ruan J., Fauchet P.M., Dal Negro L., Cazzanelli M., Pavesi L.* // Appl. Phys. Lett. 2003. V. 83. N 26. P. 5479.
- [4] *Гусев О.Б., Прокофьев А.А., Маслова О.А., Тербуков И.Е., Ясиевич И.Н.* // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93. В. 3. С. 162.
- [5] *Irrera A., Pacifici D., Miritello M., Franzo G., Priolo F., Iacona F., Sanfilippo D., Stefano G.Di, Fallica P.G.* // Physica E. 2003. V. 16. N 3/4. P. 395.
- [6] *Walters R.J., Bourianoff G.I., Atwater A.* // Nat. Mater. 2005. V. 4. N 2. P. 143–146.
- [7] *Phillip H.R., Taft E.A.* // Phys. Rev. 1960. V. 120. N 1.
- [8] *Welkowsky M., Braunstein R.* // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. N 2. P. 497.
- [9] *Phillip H.R.* // J. Appl. Phys. 1972. V. 43. N 6. P. 2835.
- [10] *Hulthen R.* // Physica Scripta. 1975. V. 12. P. 342.
- [11] *Путер Ю., Кардона М.* Основы физики полупроводников. М.: Физматлит, 2002.
- [12] Landolt-Bornstein. New Series III/22a.