

# Прозрачность макропористого кремния со сквозными каналами

© Е.В. Астрова, Л.И. Коровин, И.Г. Ланг, А.Д. Ременюк<sup>¶</sup>, В.Б. Шуман

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 15 мая 2002 г. Принята к печати 16 мая 2002 г.)

Выполнено экспериментальное и теоретическое исследование спектра пропускания макропористого кремния со сквозными каналами в области длин волн от 0.3 до 0.8 мкм, в которой монокристаллический кремний непрозрачен. Для теоретической интерпретации спектров привлечена общая теория дифракции. Получены выражения, учитывающие дифракцию на входе и выходе из пор, а также влияние отклонения угла падения света от нормального. Показано, что спектр пропускания достаточно хорошо описывается результатами расчета.

## 1. Введение

Макропористый кремний (*ma*-Si) представляет собой разновидность пористого кремния, в которой поры образуют на поверхности двумерную периодическую структуру и расположены вертикально или под небольшим углом к вертикали к поверхности образца, а глубина пор на порядки превышает расстояние между порами и их диаметр [1]. Наличие двумерной периодической структуры высокого совершенства и высокого контраста показателя преломления в *ma*-Si позволяет использовать его как двумерный фотонный кристалл, в котором при распространении света перпендикулярно оси пор проявляется фотонная запрещенная зона. Ее спектральное положение и ширина определяются симметрией структуры, расстоянием между порами и их радиусом [2]. При распространении света вдоль осей пор *ma*-Si может быть использован для создания резкого коротковолнового фильтра, пропускающего свет в коротковолновой области и задерживающего длинноволновое излучение [3]. Фильтры со спектральной характеристикой такого типа используются во многих системах, создающих изображение. Обычно это многослойные структуры из тонких пленок, нанесенных на стеклянную подложку. В коротковолновой области сами материалы, из которых изготовлены фильтры, ограничивают их пропускание. В фильтрах, использующих *ma*-Si, средой, в которой распространяется свет, является воздух в порах, окруженных непрозрачным в видимой области кремнием. Размеры пор, т.е. их диаметр и длина, формируют вид спектра пропускания фильтра. К настоящему времени нам известна только одна работа [3], посвященная исследованию пропускания *ma*-Si в видимой области спектра, и работа [4], популяризирующая ее. Настоящая работа посвящена дальнейшему экспериментальному и теоретическому исследованию оптического пропускания *ma*-Si в видимой области спектра при распространении света вдоль оси пор.

## 2. Эксперимент

Образцы для исследования представляли собой пластины кремния *n*-типа с удельным сопротивлением 15 Ом · см, диаметром 25 мм и толщиной 300 мкм, в которых методом фотоэлектрохимического травления были получены глубокие периодически расположенные каналы. Технология изготовления *ma*-Si описана в [5]. Периодическое расположение пор имело гексагональную симметрию, расстояние между центрами пор  $d = 12$  мкм и диаметр пор  $2R$  от 5 до 8.6 мкм. Непосредственно после изготовления *ma*-Si диаметр пор получался близким к 3 мкм, а средняя глубина  $L \approx 150$ –200 мкм. Чтобы получить однородные сквозные поры, беспористая часть подложки и слой с затравочными ямками удалялись с помощью механической полировки. Последующее увеличение диаметра пор осуществлялось с помощью многократного окисления образца и последующего травливания окисла с его поверхности и стенок пор. Параметры образцов приведены в таблице.

№ образца	$R$ (мкм)	$L$ (мкм)	Пористость (%)
1	2.5	170	15.6
2	3.4	180	29.0
3	4.3	180	46.0
4	4.1	208	41.8

Изображение, полученное с помощью электронного сканирующего микроскопа для образца с диаметром пор 4.0 мкм, показано на рис. 1. Из фотографии видно, что поры получаются параллельными и их диаметр мало меняется по длине, хотя и наблюдается небольшая гофрировка стенок.

Измерение спектра пропускания в области длин волн 0.3–0.8 мкм выполнялось с помощью спектрофотометра СФ-26. Свет от монохроматора падал на поверхность образца нормально с углом расхождения пучка, близким к  $3.1^\circ$ , и после прохождения образца дополнительно не фокусировался. Спектры пропускания для четырех образцов с различными диаметрами и длинами сквозных пор показаны на рис. 2. Из этого рисунка видно, что

<sup>¶</sup> E-mail: arem@mail.ioffe.ru  
Fax: (812) 2479123

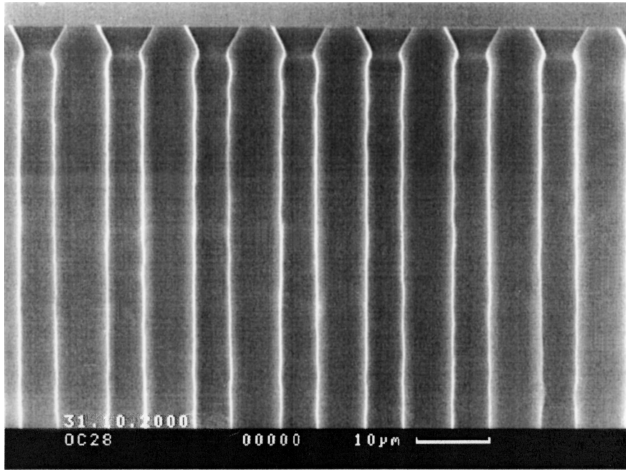


Рис. 1. SEM-изображение одного из образцов *ma*-Si до снятия слоя затравочных ямок.

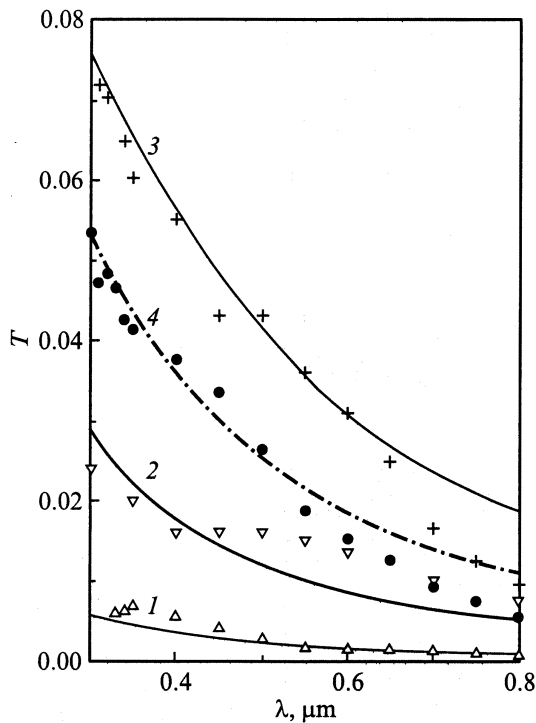


Рис. 2. Спектр пропускания четырех образцов *ma*-Si. Точки — эксперимент, кривые построены по формуле (7). 1 — образец № 1, 2 — образец № 2, 3 — образец № 3, 4 — образец № 4.

пропускание *ma*-Si максимально в ультрафиолетовой и фиолетовой областях спектра и падает при увеличении длины волны.

### 3. Обсуждение результатов

Характер и природа оптического пропускания в видимой области спектра в монокристаллическом и нанопористом кремнии и *ma*-Si совершенно различны. Для сравнения на рис. 3 приведены спектры пропускания для

монокристаллического кремния [6], люминесцирующего нанопористого кремния [7] и *ma*-Si (результаты настоящей работы). Для интерпретации спектров пропускания *ma*-Si существенно, что при распространении видимого света вдоль оси пор передача излучения осуществляется по полностью прозрачным каналам с показателем преломления  $n = 1$ , расположенным в поглощающей в этой спектральной области среде кремния. Диаметр пор (ми-

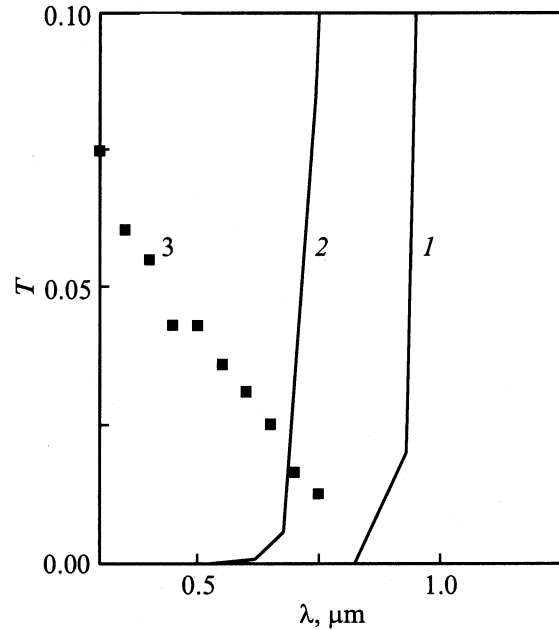


Рис. 3. Спектр пропускания монокристаллического кремния (1) [6], нанопористого кремния (2) [7] и макропористого кремния (3).

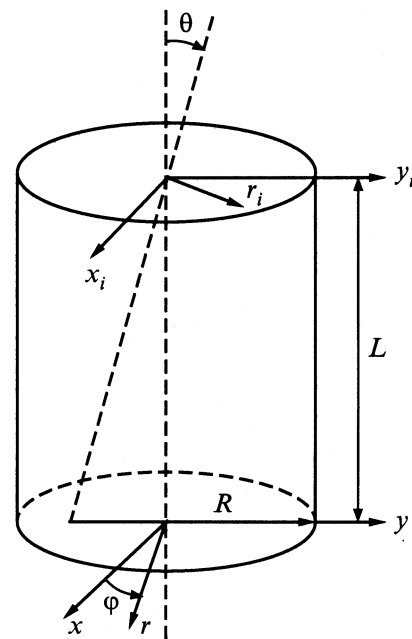


Рис. 4. Схема прохождения света через пору при наклонном падении.

нимальный диаметр поры — 5 мкм), расстояние между порами  $d = 12$  мкм и толщина пластин существенно превышают длины световых волн (максимальная длина волны при измерении пропускания  $\lambda = 0.8$  мкм). Поэтому для теоретической интерпретации спектров пропускания *ma*-Si можно привлечь общую теорию дифракции [8]. Отверстие будем считать круглым. На рис. 4 схематически изображена пора с радиусом  $R$  в пластине толщиной  $L$ .

Задачу удобно решать в несколько этапов. На первом этапе рассмотрим нормальное падение света на пластину из *ma*-Si и учтем только дифракцию света на входном отверстии одиночной поры. Определим распределение интенсивности света  $I(r)$  на плоскости выходного отверстия поры, учитывая только дифракцию от входного отверстия при нормальном падении света, т.е. при  $\theta = 0$ . Используя в качестве исходной формулу (59,2) из работы [8, с.194], получаем

$$I(r) = I_0 Z(r), \quad (1)$$

где  $I_0$  — интенсивность падающего света,

$$Z(r) = \left[ \int_0^\beta dt \cos t \cdot J_0(\sqrt{at}) \right]^2 + \left[ \int_0^\beta dt \sin t \cdot J_0(\sqrt{at}) \right]^2, \quad (2)$$

где  $t = \pi r_i^2 / \lambda L$  — переменная интегрирования,  $a = 4\pi r^2 / \lambda L = 4\beta r^2 / R^2$ ,  $\beta = \pi / R^2 / \lambda L$ ,  $J_0(z)$  — функция Бесселя. Рассмотрим различные предельные случаи. При  $\lambda \rightarrow 0$  должен происходить переход к геометрической оптике. Действительно, в этом пределе функция  $Z(r)$  переходит в ступенчатую функцию

$$Z_{\lambda \rightarrow 0}(r) = \begin{cases} 1, & r < R \\ 0, & r > R \end{cases}, \quad (3)$$

т.е.  $I(r) = I_0$  в пределах выходного отверстия поры и  $I(r) = 0$  вне этих пределов. Для доказательства соотношения (3) заметим, что при  $r < R$ , что соответствует условно  $\beta > a/4$ , в пределе  $\lambda \rightarrow 0$ , интегралы из (2) равны [9, с.749]

$$\int_0^\infty dt \cos t \cdot J_0(\sqrt{at}) = \sin \frac{a}{4},$$

$$\int_0^\infty dt \sin t \cdot J_0(\sqrt{at}) = \cos \frac{a}{4}, \quad (3a)$$

что при подстановке в (2) дает  $Z_{\lambda \rightarrow 0} = 1$ . Те же интегралы при  $\lambda \rightarrow 0$ , но  $\beta < a/4$ , равны 0, что дает  $Z_{\lambda \rightarrow 0} = 0$ .

Анализируя (2), находим, что распределение интенсивности света на выходе из поры определяется величиной параметра  $\beta$ . Он является произведением малого  $R/L$  и большого  $\pi R/\lambda$  параметров, поэтому в рамках

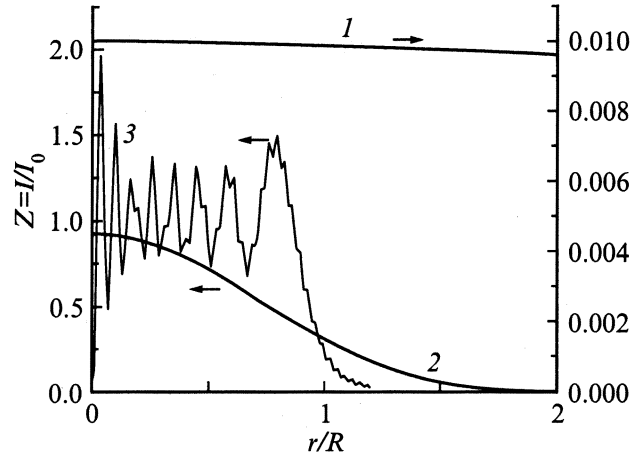


Рис. 5. Функция  $Z(r)$  при различных параметрах  $\beta$ : 1 —  $\beta = 0.1$  (правая шкала), 2 —  $\beta = 1$  (левая шкала), 3 —  $\beta = 50$  (левая шкала).

теории дифракции может быть как много меньше, так и много больше единицы. В случае  $\beta \gg 1$  имеет место дифракция Френеля, в случае  $\beta \ll 1$  — дифракция Фраунгофера [8]. В последнем случае из (2) приближенно получаем

$$Z_B(r) = \frac{R^2}{r^2} J_1^2 \left( \frac{2\pi Rr}{\lambda L} \right), \quad (4)$$

где  $J_1(z)$  — функция Бесселя. Если аргумент функции  $z = (2\pi Rr/\lambda L) \ll 1$ , то  $J_1(z) \approx z/2$  и приближенно получаем

$$Z_A(r) \approx \frac{\pi^2 R^4}{\lambda^2 L^2} = \beta^2, \quad (5)$$

т.е. при малых величинах  $r$  в случае дифракции Фраунгофера величина  $Z_A(r)$ , определяющая распределение интенсивности света на выходной плоскости поры, от  $r$  не зависит.

Проиллюстрируем вышесказанное с помощью рис. 5, на котором изображены функции  $Z(r)$ , определенные численным интегрированием по формуле (2), при различных значениях параметра  $\beta$ . Кривая 1 соответствует значению  $\beta = 0.1$ . В пределах  $r < R$  величина  $Z(r) \approx 0.01$ , т.е. очень мала, и остается практически постоянной. Почти вся световая энергия уходит за пределы круга с радиусом  $R$  на нижней плоскости, т.е. не доходит до нижнего отверстия поры, а падает на боковые стенки. Кривая 1 хорошо описывается приближенной формулой (4), а в пределах  $r < R$  — формулой (5). Кривая 2 соответствует значению  $\beta = 1$ . Это промежуточный случай между дифракцией Фраунгофера и Френеля. На рисунке видно, что в пределы круга  $r < R$  попадает доля энергии, сравнимая с единицей. Наконец, кривая 3 соответствует очень большому значению  $\beta = 50$  (в эксперименте эти величины  $\beta$  не достигаются, реальные значения  $\beta$  лежат в пределах от 0.15 до 1.6). Почти вся энергия в этом случае попадает в пределы

круга  $r < R$ , при  $r > R$  величина  $Z(r)$  очень мала. Это приближение геометрической оптики, когда вся энергия, падающая на входное отверстие поры, доходит до выходного отверстия.

В общем случае сквозь пору проходит только то излучение, которое попадает на выходное отверстие поры радиуса  $R$ . Доля энергии, дошедшей до выходного отверстия поры, равна  $(2\pi/S_0) \int_0^R r dr Z(r)$ , где  $S_0 = \pi r^2$  — площадь отверстия поры. Умножив эту величину на пористость, которая в случае гексагонального расположения пор равна

$$P = (2\pi/\sqrt{3})(R/d)^2, \quad (6)$$

находим, что пропускание пластины из *ma*-Si равно:

$$T(\lambda) = \frac{4\pi}{\sqrt{3}d^2} \int_0^R r dr Z(r). \quad (7)$$

При  $\lambda \rightarrow 0$ , т.е. в пределе геометрической оптики, когда функция  $Z(r)$  имеет вид (3), получаем

$$T(\lambda \rightarrow 0) = P. \quad (8)$$

При условии  $\beta \ll 1$ , когда имеет место дифракция Фраунгофера,

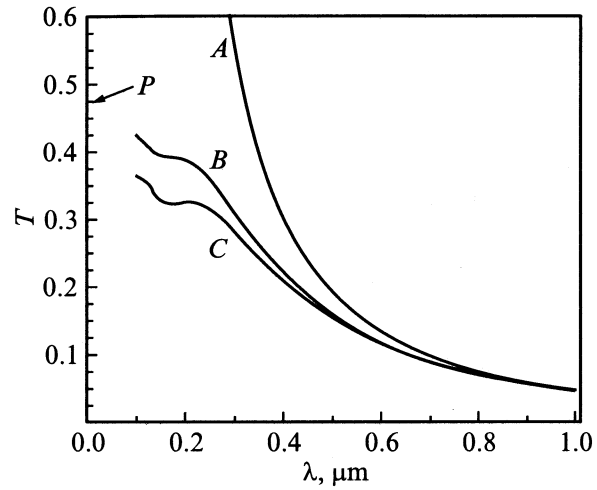
$$T_B(\lambda) = \frac{4\pi R^2}{\sqrt{3}d^2} \int_0^R \frac{dr}{r} J_1^2\left(\frac{2\pi Rr}{\lambda L}\right). \quad (9)$$

Отметим, что в пределе  $\lambda \rightarrow 0$  формула (9) также дает результат  $T_B(\lambda \rightarrow 0) = P$ . Из сравнения выражений (2) и (4) можно заключить, что в пределе геометрической оптики, т.е. при  $\lambda \rightarrow 0$ , формула (4), описывающая дифракцию Фраунгофера, дает неправильный результат для распределения интенсивности света на плоскости выходного отверстия поры. Согласно (4), при  $\lambda \rightarrow 0$  интенсивность отлична от нуля только в точке  $r = 0$  (поскольку  $J_1(z) \rightarrow 0$  при  $z \rightarrow \infty$ ), тогда как согласно (2) интенсивность отлична от нуля в круге радиуса  $R$  с центром в точке  $r = 0$ . Однако интегрирование выражений  $Z(r)$  и  $Z_B(r)$  по координате  $r$  в предельном случае  $\lambda \rightarrow 0$  дает одинаковые результаты. Наконец, в приближении (5) получаем

$$T_A(\lambda) = P\beta^2 = \frac{2\pi^3 R^6}{\sqrt{3}d^2 \lambda^2 L^2}, \quad (10)$$

из которой видно, что прозрачность *ma*-Si зависит от  $R$ , как шестая степень, а от длины волны, как  $\lambda^{-2}$ . Для интерпретации результатов в работе [3] были использованы выражения (9) и (10).

На рис. 6 приведены кривые зависимости  $T(\lambda)$ , вычисленные по трем различным формулам: (7) с подстановкой (2) — кривая *C*, (9) — кривая *B* и (10) — кривая *A*. Видно, что при достаточно больших значениях  $\lambda$  все



**Рис. 6.** Расчетный спектр пропускания образца № 3 в приближении геометрической оптики (*A*), в приближении Фраунгофера (*B*) и при расчете по общей формуле (7) (*C*) для образца № 3.

кривые сливаются, что означает проявление дифракции Фраунгофера. При малых значениях  $\lambda$  кривая *A* очень сильно отклоняется от кривых *B* и *C*, а последние при  $\lambda \rightarrow 0$  стремятся к точке  $T(\lambda \rightarrow 0) = P$ , обозначенной на оси ординат.

Результаты сравнения экспериментальных результатов и теоретических кривых  $T(\lambda)$ , построенных с использованием наиболее точных формул (2) и (7), согласованные с экспериментальными значениями прозрачности, приведены на рис. 2. Теория достаточно хорошо описывает форму кривых  $T(\lambda)$ , однако абсолютные величины пропускания, измеренные в эксперименте, в 3.5 раза меньше теоретических для образца 3 (кривая 3) и в 3.5 и в 4 для образцов 1 и 2 (кривые 1 и 2 соответственно). Приведенные на рис. 2 теоретические результаты уменьшены до совмещения с экспериментальными данными.

Обсудим возможные причины, по которым измеренные величины пропускания существенно меньше теоретических.

Первая причина — в эксперименте не выполняется условие нормального падения параллельного пучка лучей на поверхность образца, что предполагалось при выводе формулы (2). Реально из выходной щели спектрометра выходит пучок с расходимостью в  $3.1^\circ$ . Это может привести к уменьшению пропускания по сравнению с расчетной величиной, особенно в коротковолновой области, где справедлива геометрическая оптика и пропускание равно нулю, если угол падения  $\theta > 2R/L$ . Например, при  $R = 4.3$  мкм и  $L = 180$  мкм критический угол  $2R/L$  равен  $2.7^\circ$  (при  $R = 2.5$  мкм и  $L = 170$  мкм  $2R/L = 1.7^\circ$ ).

Расчеты пропускания при косом падении света на поверхность образца подтверждают это предположение. Исходя из формулы (59.2) [8,с.194], получаем, что рас-

пределение интенсивности падающего света на нижней плоскости поры определяется формулой

$$I(\mathbf{r}, \theta) = I_0 Z(\mathbf{r}, \theta), \quad (11)$$

$$Z(\mathbf{r}, \theta) = Z(r, \varphi, \theta) = \left[ \int_0^\beta dt \cos t \cdot J_0(\sqrt{a(r, \varphi)t}) \right]^2 \times \left[ \int_0^\beta dt \sin t \cdot J_0(\sqrt{a(r, \varphi)t}) \right]^2, \quad (12)$$

где

$$a(r, \varphi) = \frac{4\pi}{\lambda L} (r^2 + L^2\theta^2 + 2rL\theta \sin \varphi), \quad (13)$$

$\theta$  — угол наклона падающих световых лучей, который мы считаем малым:  $\theta \ll 1$ , при этом  $\sin \theta \approx \text{tg } \theta \approx \theta$ ,  $\cos \theta \approx 1$ ,  $\varphi$  — азимутальный угол (см. рис. 4). Формулу (12) можно интерпретировать очень просто: распределение интенсивности в нижней плоскости при косом падении такое же, как при нормальном падении, но центром этого распределения вместо точки  $\mathbf{r} = 0$  становится точка с координатами  $x = 0$ ,  $y = -L \cdot \theta$ .

В предельном случае геометрической оптики из (11) и (12) получаем, что интенсивность света на выходной плоскости равна  $I_0$  в пределах круга радиуса  $R$  с центром в точке  $x = 0$ ,  $y = -L \cdot \theta$ . Переход к формулам  $Z_B(\mathbf{r}, \theta)$  и  $Z_A(\mathbf{r}, \theta)$  от выражения (12) для  $Z(\mathbf{r}, \theta)$  осуществляется точно так же, как при рассмотрении случая нормального падения света.

Для вычисления пропускания в случае фиксированного угла  $\theta$  нужно проинтегрировать величину  $Z(\mathbf{r}, \theta)$  в пределах круга с радиусом  $R$  вблизи начала координат  $\mathbf{r} = 0$ , т.е. в пределах выходного отверстия поры, разделить результат на  $\pi R^2$  и умножить на пористость  $P$ , определенную в (6). Получаем

$$T(\lambda, \theta) = \frac{2}{\sqrt{3}d^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr Z(r, \varphi, \theta), \quad (14)$$

а также

$$T_B(\lambda, \theta) = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{R^2}{d^2} \int_0^\pi d\varphi \int_0^R \frac{r dr}{r^2 + L^2\theta^2 + 2rL\theta \sin \varphi} \times J_1^2\left(\frac{2\pi R \sqrt{r^2 + L^2\theta^2 + 2rL\theta \sin \varphi}}{\lambda L}\right), \quad (15)$$

$$T_A(\lambda, \theta) = \frac{2\pi^3 R^6}{\sqrt{3}d^2 \lambda^2 L^2}. \quad (16)$$

В случае последнего приближения, которое мы обозначаем индексом А, пропускание не зависит от угла  $\theta$ ! Но заметим, что это приближение применимо лишь при условии  $\frac{2\pi R \sqrt{r^2 + L^2\theta^2 + 2rL\theta \sin \varphi}}{\lambda L} \ll 1$ , которое является более жестким, чем условие  $2\pi R^2/\lambda L \ll 1$ , применимое

к случаю нормального падения. В пределе геометрической оптики с помощью (14) получаем очевидный результат

$$T(\lambda \rightarrow 0, \theta) = P \frac{S(R, L\theta)}{\pi R^2}, \quad (17)$$

где  $S(R, L\theta)$  — площадь перекрытия двух кругов радиуса  $R$  с расстоянием  $L\theta$  между центрами. Путем элементарного вычисления находим

$$S(R, L\theta) = \begin{cases} 2R^2 \arccos \frac{L\theta}{2R} - L\theta \sqrt{R^2 - (L\theta)^2/4} & \text{при } \theta < \frac{2R}{L}, \\ 0 & \text{при } \theta > \frac{2R}{L}. \end{cases} \quad (18)$$

На рис. 7 приведены зависимости пропускания  $T$  от длины волны  $\lambda$  при фиксированных значениях углов  $\theta$  для образца 3. Видно, что при больших значениях  $\lambda$  все кривые сближаются, т.е. зависимость пропускания от угла падения  $\theta$  уменьшается с ростом  $\lambda$ . При малых значениях  $\lambda$  зависимость пропускания от угла  $\theta$  очень сильна. Для сравнения с экспериментальными данными необходимо усреднить величины  $T(\lambda)$  по углу  $\theta$  в пределах от 0 до  $\theta_0$ , т.е. вычислить

$$\bar{T}(\lambda) = \frac{1}{\theta_0} \int_0^{\theta_0} d\theta T(\lambda, \theta). \quad (19)$$

Результаты этого усреднения представлены на рис. 8 для образцов 1 и 3. Кривые 1 и 3 вычислены с усреднением по полярному углу в пределах от 0 до  $3.1^\circ$ ; кривые 2 и 4 соответствуют нормальному падению пучка. На рис. 8 видно, что при  $\lambda \approx 0.2$  мкм разброс углов падения света приводит к уменьшению пропускания приблизительно в 2 раза для обоих образцов, при  $\lambda \approx 1$  мкм влияние разброса по углам можно считать слабым.

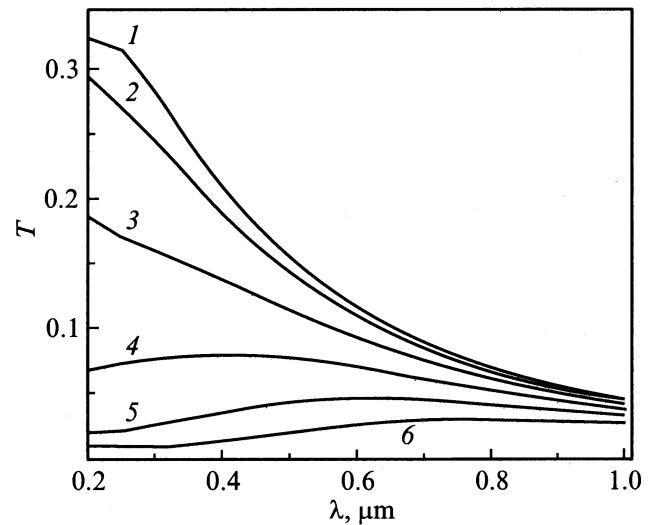
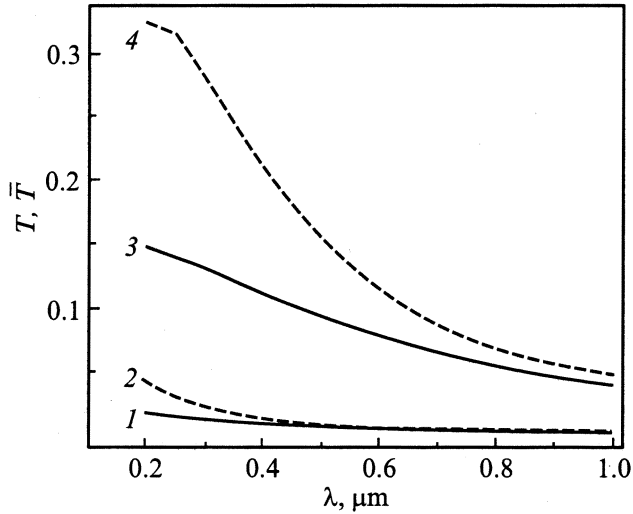
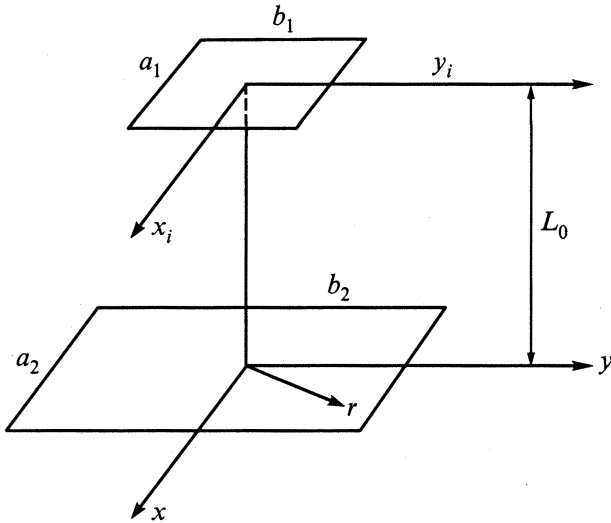


Рис. 7. Пропускание поры образца № 3, рассчитанное по (14). Угол падения  $\theta$ : 1 —  $0^\circ$ , 2 —  $0.62^\circ$ , 3 —  $1.24^\circ$ , 4 —  $1.86^\circ$ , 5 —  $2.48^\circ$ , 6 —  $3.1^\circ$ .



**Рис. 8.** Расчетные спектры пропускания для образца № 1 — кривые 1, 2 и образца № 3 — кривые 3, 4. 1 и 3 (сплошные) вычислены с усреднением по полярному углу, 2 и 4 (пунктир) соответствуют нормальному падению пучка.



**Рис. 9.** Модель эксперимента: прямоугольник  $a_1b_1$  — образец как источник, прямоугольник  $a_2b_2$  — как приемник света.

Второй причиной различия теоретических и экспериментальных результатов может быть пренебрежение дифракцией на выходных отверстиях пор. Об этом свидетельствует отклонение теоретической кривой от экспериментальных точек в длинноволновой области (см. рис. 2). Эта дифракция должна приводить к расходимости пучка света на выходе из каждой поры, причем эта расходимость возрастает с ростом длины волны. Поэтому в случае больших длин волн часть светового пучка, прошедшего через образец, оказывается за пределами приемника, что приводит к кажущемуся уменьшению пропускания  $T$ . В последующем расчете мы не будем учитывать интерференцию света, исходящего от отдельных пор, т.е. будем складывать интенсивности, а

не электрические поля от всех пор, поскольку эффект интерференции не должен существенно повлиять на величину полной мощности, попадающей на приемник.

Смоделируем экспериментальные условия в виде прямоугольного источника и приемника света (рис. 9), расположенных в параллельных плоскостях с расстоянием  $L_0$  между ними. Источник представляет собой пластину из  $ma$ -Si, из выходных отверстий пор которой выходит свет. Распределение интенсивности на выходе из одной поры, расположенной в точке  $x_i = 0$ ,  $y_i = 0$ , определяется формулами (1) и (2), однако вместо толщины пластины  $L$  следует подставить расстояние  $L_0$ , которое равно 11 см согласно условиям эксперимента. Оценим параметр  $\beta = \pi R^2 / \lambda L_0$ . Выбрав для примера  $R = 4.3$  мкм,  $\lambda = 0.3$  мкм,  $L_0 = 11$  см, получим  $\beta \approx 1.7 \cdot 10^{-3}$ ; условие  $\beta \ll 1$  выполняется очень хорошо, поэтому будем пользоваться формулой (4) Фраунгофера, в которой следует заменить  $L$  на  $L_0$ . Интенсивность на нижней плоскости в точке  $(x, y)$  от одной поры, расположенной в точке с координатами  $(x_i, y_i)$ , очевидно, равна  $I Z_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ , где  $I$  — интенсивность на выходном отверстии поры,

$$Z_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = \frac{R^2}{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2} \times J_1^2 \left( \frac{2\pi R \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}}{\lambda L_0} \right). \quad (20)$$

Интенсивность в выходной плоскости  $ma$ -Si в точке  $x, y$  от всех пор, расположенных в прямоугольнике со сторонами  $a_1, b_1$ , равна

$$I(x, y) = nI \int_{-a_1/2}^{a_1/2} dx_i \int_{-b_1/2}^{b_1/2} dy_i Z_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i), \quad (21)$$

где  $n$  — число пор на единицу площади. Вместо функции  $I(x, y)$  введем функцию  $Q(x, y) = KI(x, y)$ , нормированную таким образом, чтобы выполнялось условие

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy Q(x, y) = 1. \quad (22)$$

Константа  $K$  определяется условием нормировки (22). Выполнив несложные вычисления, определим константу  $K$  и в итоге получим

$$Q(x, y) = \frac{1}{\pi a_1 b_1} \times \int_{-a_1/2}^{a_1/2} dx_i \int_{-b_1/2}^{b_1/2} dy_i \frac{J_1^2 \left( \frac{2\pi R \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}}{\lambda L_0} \right)}{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}. \quad (23)$$

Проинтегрировав величину  $Q(x, y)$  в пределах прямоугольника со сторонами  $a_2, b_2$ , мы получим долю

энергии, вышедшей из образца и попавшей в приемник. Эта доля равна

$$H(\lambda) = \int_{-a_2/2}^{a_2/2} dx \int_{-b_2/2}^{b_2/2} dy Q(x, y). \quad (24)$$

При  $a_2 \rightarrow \infty, b_2 \rightarrow \infty$  величина  $H(\lambda) \rightarrow 1$ . Это означает, что вся энергия, вышедшая из источника, попадает в приемник.

Кривые зависимостей  $H(\lambda)$  изображены на рис. 10 для образцов разных размеров: № 3 — с параметрами  $a_1 = 0.6$  см,  $b_1 = 1.5$  см,  $a_2 = 1$  см,  $b_2 = 3.5$  см,  $L_0 = 11$  см и № 1 с  $a_1 = 0.3$  см,  $b_1 = 1.5$  см,  $a_2 = 1$  см,  $b_2 = 3.5$  см,  $L_0 = 11$  см. Потери энергии возрастают с ростом длины волны  $\lambda$ . Вблизи  $\lambda = 0.2$  мкм эти потери не превышают 10% для обоих образцов, а при  $\lambda = 1$  мкм для образца с  $R = 2.5$  мкм достигают 50%. Потери существенно больше в случае образца с меньшим радиусом пор.

На рис. 11 приведены итоговые теоретические кривые для двух образцов, учитывающие поправки двух типов — поправки на отклонение от нормального падения света и от потерь энергии из-за дифракции на выходных отверстиях пор. Эти кривые построены по формуле

$$T_{re}(\lambda) = \bar{T}(\lambda)H(\lambda). \quad (25)$$

Поправки первого типа уменьшают величины  $T_{re}(\lambda)$  при малых  $\lambda$ , второго типа — при больших  $\lambda$ . Поэтому одновременный учет поправок обоих типов не сильно меняет форму кривых  $T_{re}(\lambda)$  по сравнению с формой, полученной без учета поправок, а только уменьшает абсолютную величину величины  $T_{re}(\lambda)$  при всех значениях  $\lambda$  в  $\cong 2.5$  раза. Тем не менее экспериментальные значения пропускания при качественном совпадении спектрального хода отличаются по величине в  $\cong 1.2-1.7$  раза от рассчитанных по формулам с поправками. Причиной этому может быть несколько факторов.

1. Небольшая часть пор ( $\cong 20\%$ ) не проросла до выходной поверхности образца.
2. Как видно из рис. 1, поверхность каналов не строго цилиндрическая, а имеет небольшую гофрировку, которая в теории не учитывалась.
3. Возможно недостаточно точное определение радиусов пор. Даже небольшая неточность в величине радиуса приводит к сильному изменению пропускания как при малых, так и при больших значениях  $\lambda$ . При малых  $\lambda$ , когда „работает“ геометрическая оптика, это может происходить из-за разброса углов падения и сильной зависимости пропускания от параметра  $2R/L$  (см. формулы (17)–(18)). При достаточно больших величинах  $\lambda$ , когда имеет место дифракция Фраунгофера и применимы формулы (10) и (16), величина пропускания пропорциональна  $R^6$ , т.е. очень сильно зависит от радиуса поры. Например, если радиус поры уменьшить на 10%, то пропускание уменьшается вдвое.

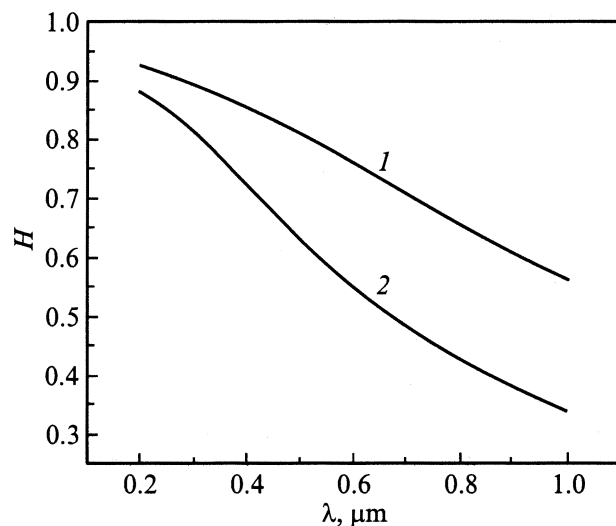


Рис. 10. Отношение интенсивности света на приемнике к интенсивности на выходе из образца: образец № 1 — кривая 2,  $a_1 = 0.3$  см, образец № 3 — кривая 1,  $a_1 = 0.6$  см.

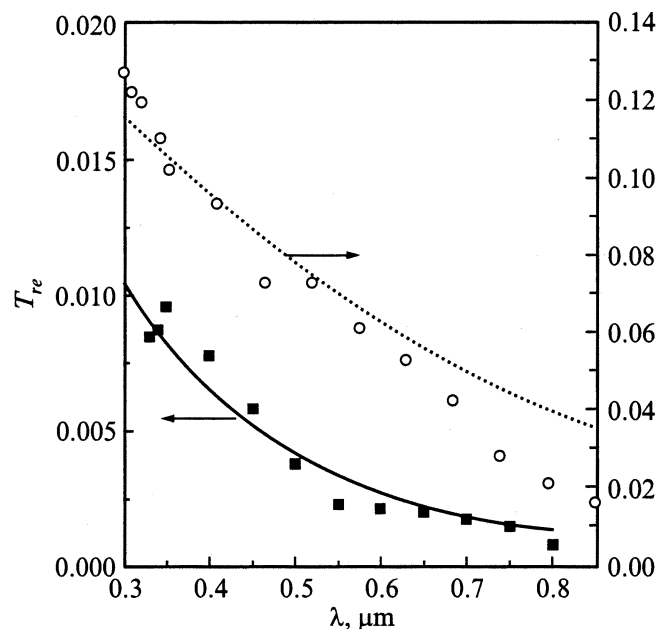


Рис. 11. Сопоставление расчетных кривых спектров пропускания, учитывающих поправки на расходящийся пучок и на дифракцию на выходе пор для образцов № 3 — пунктирная кривая (расчет) и кружки (эксперимент) и № 1 — сплошная кривая (расчет) и квадраты (эксперимент). Расчетные данные уменьшены до совмещения с экспериментальными.

4. При больших величинах  $\lambda$  не очень хорошо выполняется условие  $\lambda \ll 2R$  ( $\lambda/2R = 0.16$  при  $\lambda = 0.8$  мкм и  $R = 2.5$  мкм), поэтому могут быть отклонения от основной формулы дифракции, взятой за исходную из [8].
5. При вычислении величины  $H(\lambda)$  — потерь энергии на выходе пор — не учтено косое падение света на выходное отверстие поры, которое может привести к еще

большему расхождению по углам светового пучка на выходе из каждой поры и уменьшить величину энергии, попадающей на приемник.

С другой стороны, теория не учитывает отражения света от внутренней поверхности пор, так как считается, что свет, попавший на эти поверхности, не доходит до выходных отверстий пор. Однако многократные отражения от внутренних поверхностей с последующим выходом из пор могут в принципе привести к некоторому увеличению пропускания.

#### 4. Заключение

Средой распространения света в макропористом кремнии при направлении волнового вектора света вдоль осей пор или под небольшим углом к ним является воздух — среда, не проявляющая ни поглощения, ни дисперсии в видимой области. Поскольку геометрические параметры пор могут быть заданы технологически, можно создать макропористый кремний с такими диаметром и длиной пор, что видимый свет будет претерпевать дифракцию на отверстиях в непрозрачном экране, которая будет определять спектр его пропускания. Действительно, полученные нами экспериментальные спектры пропускания при прохождении света вдоль осей пор достаточно хорошо описываются рассчитанными на основе общей теории дифракции с учетом дифракции на входе и выходе пор и влияния отклонения угла падения света от нормального к поверхности образца.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 00-15-96770 и № 00-02-16904), Программы СПбНЦ „Низкотемпературные квантовые структуры“, и МПНТ „Физика твердотельных наноструктур“ и „Создание компонент сетей связи, программного обеспечения и базы данных фундаментальной науки и образования“, а также гранта INTAS (проект № 01-642).

#### Список литературы

- [1] V. Lehman, U. Gruning. *Thin Sol. Films*, **297**, 13 (1997).
- [2] N. Winn, R.D. Meade, J.D. Joannopoulos. *J. Modern Optics*, **41**, 257 (1994).
- [3] V. Lehman, R. Stengl, H. Reisinger, R. Detemple, W. Theiss. *Appl. Phys. Lett.*, **78**, 589 (2001).
- [4] J. Wallace. *Laser Focus World*, April 2001, p. 36.
- [5] Е.В. Астрова, А.Д. Ременюк, А.Г. Ткаченко, И.Л. Шульпина. *Письма ЖТФ*, **26** (24), 31 (2000).
- [6] Т.С. Мосс, *Оптические свойства полупроводников* (М., ИЛ, 1961).
- [7] E.V. Astrova, S.V. Belov, A.A. Lebedev, A.D. Remenyuk, Yu.V. Rud'. *Thin Sol. Films*, **255**, 196 (1995).
- [8] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория поля* (М., 1973).
- [9] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (М., 1962) с. 749.

Редактор Л.В. Беляков

#### Optical transparency of macroporous silicon with through pores

E.V. Astrova, L.I. Korovin, I.G. Lang, A.D. Remenyuk, V.B. Shuman

Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The results of theoretical and experimental studies of spectral characteristics of macroporous Si with through pores within the wave range from 0.3  $\mu\text{m}$  to 0.8  $\mu\text{m}$  (where monocrystalline and nanoporous Si are absorbant) are presented. The general expression for calculation of theoretical spectra was obtained using a general diffraction theory, taking into account the diffraction at the pore entrance and exit as well as the dependence on the angle of incidence of light. The experimental data correlate with the theoretical model.