

CALCULO PARA DETERMINAR LAS CONSTANTES OPTICAS EN PELICULAS DELGADAS DE SILICIO POROSO

Carlos Peña¹, Jaime Torres²

Grupo de Física de la Materia Condensada. Departamento de Física
Universidad Nacional de Colombia. Santa fe de Bogotá. Colombia

RESUMEN

En este trabajo se propone un método para calcular las constantes ópticas en películas delgadas de silicio poroso (SP), a partir de la simulación teórica de los espectros experimentales de reflectancia a incidencia normal. En el sistema óptico usado en este modelo, el SP es considerado como una película delgada homogénea y absorbente, depositado sobre un sustrato de silicio de dimensión semi-infinito. Se utiliza el método de Sumación y el modelo de Davies-Bennett, para obtener la expresión teórica de la reflectancia. En la parte real del índice de refracción del SP se usa el modelo del oscilador armónico simple, propuesto por Wemple- DiDomenico. Con el método se puede obtener el espesor promedio de la película de SP, y se analiza la participación del sustrato en la absorción del sistema óptico. Las muestras se fabricaron por el método de anodización electroquímica en solución de HF+IA, usando sustratos de silicio tipo-p, <100> y resistividad entre $0.7 - 1 \Omega\text{-cm}$. Se prueba el método en diferentes muestras fabricadas con diferentes tiempos de anodización.

INTRODUCCIÓN

Luego de que Canham reportó una intensa señal de fotoluminiscencia en el silicio poroso [1], se han realizado grandes esfuerzos, destinados a explicar el comportamiento óptico de este material. La determinación de las constantes ópticas en el silicio poroso se realiza preferiblemente a través de medidas de reflectancia o elipsometría ya que son técnicas no destructivas y pueden utilizarse con películas depositadas sobre sustratos no transparentes[2]. Independientemente si se usa elipsometría o reflectancia, la obtención de las constantes ópticas se realiza a través de la reproducción teórica de los espectros experimentales. En este trabajo se propone un método de calculo que permite obtener las propiedades ópticas (índice de refracción efectivo $\eta_2(\lambda)$, coeficiente de absorción $\alpha(\lambda)$, el espesor y la rugosidad de la película de silicio poroso. El método se basa en la reproducción teórica de los espectros experimentales de reflectancia obtenidos entre 300 y 1000 nm. Se presentan resultados obtenidos en dos muestras fabricadas a 25 y 35 minutos de anodización.

TEORIA

El silicio poroso (SP) esta compuesto por dos fases: aire y nanocristales de silicio; se puede tratar como un medio efectivo homogéneo [3], debido al tamaño pequeño de los nanocristales de SP. El sistema a considerar se presenta en la fig1. La película homogénea está depositada sobre un sustrato de dimensión semi-infinita.

¹ E-mail: carlospe@estudiantes.fisica.unal.edu.co

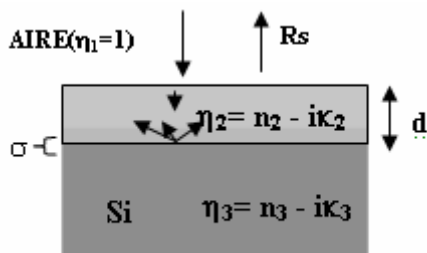


Fig.1. sistema de una película delgada absorbente de SP depositada sobre un sustrato absorbente de dimensión semi-infinita de silicio

La reflectancia del sistema (R_s), a incidencia normal se calcula a partir de la teoría de Sumación [4], adicionalmente en el modelo es incluida la dispersión de luz a través de la teoría desarrollada por Davies-Bennett [5].

$$R_s = R_0 e^{-\frac{4\pi\eta_2\sigma}{\lambda}} \quad [1]$$

Donde:

$$R_0 = \frac{r_{12} + r_{23} e^{-i\delta}}{1 + r_{12} r_{23} e^{-i\delta}} \quad [2]$$

$$\delta = \frac{4\pi\eta_2 d}{\lambda} = m\pi \quad [3]$$

Siendo η_1 el índice de refracción del aire, η_2 el índice del SP, η_3 el del silicio monocristalino según literatura[6], σ la rugosidad de la interface SP/Si, d el espesor de la película, λ la longitud de onda y m el orden de interferencia.

RESULTADOS Y DISCUSIONES

PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO

Inicialmente se utiliza el espectro medido R_{oexp} para calcular la parte real de η_2 , el espesor d y el coeficiente de absorción, utilizando el siguiente procedimiento:

a) Se determina el orden de interferencia (m) en los máximos y mínimos usando la relación

$$m \cong \frac{\lambda_{m-1}}{\lambda_{m-1} - \lambda_m} \quad [4]$$

Donde λ_m y λ_{m-1} son las longitudes de onda asociadas a dos máximos o mínimos consecutivos. En la región de absorción débil del espectro de reflectancia experimental, asumimos inicialmente que $\kappa_2 \cong 0$.

En esta región se calcula en los mínimos un valor aproximado de n_2 usando la relación:

$$R_{\min} = \left(\frac{n_2^2 - n_1 n_3}{n_2^2 + n_1 n_3} \right)^2 \quad [5]$$

Los valores del índice de refracción en los máximos se obtienen por interpolación de los valores del índice de refracción encontrados en el paso anterior. Con estos valores y la relación $\delta = m\pi$ ec. (3), se determina un valor aproximado del espesor de la película de silicio poroso.

b) Se determina n_2 en todo el espectro, comparando permanentemente el espectro experimental (R_{exp}) con el teórico resolviendo la siguiente ecuación

$$R_o(n_1(\lambda), n_3(\lambda), \kappa_3(\lambda), d, E_d, E_o) - R_{\text{exp}} \cong 0 \quad [6]$$

En R_o se ha reemplazado n_2 , por la expresión $n_2^2 = 1 + \frac{E_d E_o}{E_o^2 - \hbar^2 \omega^2}$ obtenida en el modelo del oscilador efectivo propuesto por Wemple-DiDomenico[7]. $\hbar\omega$ es la energía del fotón, E_o la energía del oscilador efectivo y E_d la energía de dispersión.

c) el coeficiente de absorción α_2 se determina resolviendo la siguiente ecuación en toda la región espectral:

$$R_o(n_1(\lambda), n_3(\lambda), \kappa_3(\lambda), d, n_2(\lambda), \alpha_2(\lambda)) - R_{\text{exp}} \cong 0 \quad [7]$$

d) por último se calcula la rugosidad σ , utilizando el espectro $R_s = R_{\text{exp}} - D$ y resolviendo la siguiente ecuación:

$$R_s(n_1(\lambda), n_3(\lambda), \kappa_3(\lambda), d, n_2(\lambda), \kappa_2(\lambda), \sigma) - R_s \cong 0 \quad [8]$$

D es el espectro de dispersión de la muestra.

Siguiendo el procedimiento anterior se simularon varias muestras. En este trabajo presentamos resultados de dos muestras de SP fabricadas por anodización electroquímica de sustratos de silicio tipo p, <100>, $\rho = 0.7-1 \Omega\text{-cm}$ en solución de HF(25%) + alcohol isopropílico. La corriente de anodización fue de 11mA y los tiempos de anodización de 25 y 35 min.

En la figura 2 se presenta el espectro R_s , obtenido para la muestra de 35 minutos junto con el simulado. En las Figuras 3 y 4 se presentan los coeficientes de absorción e índices de refracción obtenidos para las dos muestras. En la tabla I se presentan los parámetros obtenidos para las dos muestras.

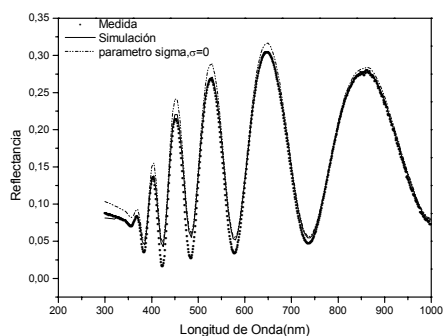


Fig No. 2. Se comparan los espectros experimental y teórico para la muestra anodizada durante 35 min. Se destaca la influencia de la rugosidad.

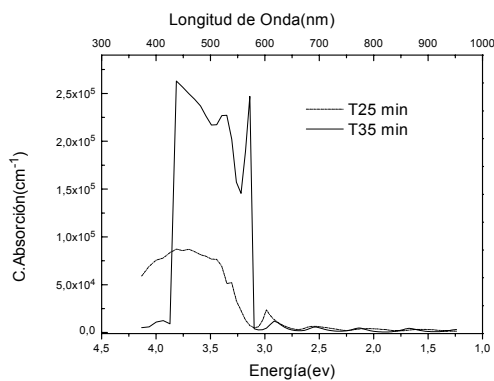


Fig No. 3. Espectros de absorción obtenidos para las muestras de 25 y 35 minutos.

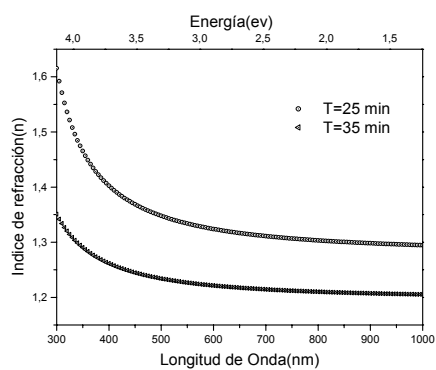


Fig No. 4. los índices de refracción obtenidos para las dos muestras

Tabla I Se presenta los valores obtenidos con el método, y el espesor medido(D) medido con un perfilometro.

Muestra	Ed(ev)	Eo(ev)	σ (nm)	d(nm)	D(μ m)
25 min	3.4	5.32	7.5	0.93	1.24
35 min	2.6	6.0	8.7	1.06	1.49

Como se observa de la figura(2), el espectro simulado reproduce adecuadamente el experimental. En la región ultravioleta (alta absorción) los dos espectros son ligeramente diferentes, esta región es fuertemente influenciada por la alta absorción y la rugosidad de la muestra, por lo que la extrapolación de los valores del índice de refracción a esta región es muy complicada. Los valores del índice de refracción n_2 difieren notablemente de los respectivos para el silicio, sin embargo no se debe olvidar que se está suponiendo que el silicio poroso es un medio homogéneo pero en realidad está compuesto por dos fases, este índice de refracción debe ser posteriormente tratado con la respectiva regla de mezcla.

CONCLUSIONES

Se propuso un procedimiento simple para determinar las constantes ópticas de películas delgadas de SP, a partir de medidas de Reflectancia total y del espectro de dispersión, Se observó que el índice de refracción, el coeficiente de absorción y el espesor de la muestra dependen fuertemente de las condiciones de fabricación, en este caso el tiempo de anodización. La confiabilidad del método fue probado al reproducir espectros de reflectancia usando parámetros calculados. El método puede ser también aplicado a otras películas delgadas, Crecidas sobre sustratos gruesos y que presenten interferencia.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue financiado por la fundación para la promoción de la investigación y la tecnología del Banco de la República.

BIBLIOGRAFIA

- [1]L.T. Canham, Appl. Phys. Lett. **Vol.** 57, (1990), p. 1046
- [2] W Theib. Optical properties o Porous Silicon, Surf, Sci. Rep.**Vol.** 29 (1997), p. 91
- [3]G. Amato, C. Deleune, H. J. Von Bardeleben. Structural and Optical Properties of Porous Silicon Nanoestructuras, capitulo 18
- [4]Heavens. O. S. Optical Properties of thin solid films. (Dover Publications), 1991
- [5]L.T. Canham, Appl. Phys. Lett. **Vol.** 57, (1990), p. 1046
- [6]PaliK T, Handbook of Optical Constants of solids (1985)
- [7]S.H. Wemple , M. DiDomenico, Phys Rev B, Vol 3, (1971), p1338