

CÁLCULO DE LA FUNCIÓN DIELECTRICA EFECTIVA EN PELÍCULAS DELGADAS DE SILICIO POROSO

A. M. Campos¹, J. Torres y J. Giraldo
 Grupo de Física de la Materia Condensada
 Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

RESUMEN

Se modeló el silicio poroso como un medio compuesto de dos fases, conformado por partículas de silicio monocristalino inmersas en una matriz homogénea de aire. Los poros del material se simularon deformando las partículas, inicialmente esféricas, hasta obtener elipsoides de alta excentricidad. Se calculó la función dieléctrica efectiva en películas delgadas de silicio poroso utilizando teorías de medio efectivo (Maxwell-Garnett, Bruggeman y Landau-Lifshitz-Looyenga (LLL)). Se simuló el índice de refracción efectivo, se reprodujo el espectro de reflectancia experimental en el rango visible y se determinó el coeficiente de absorción. La porosidad obtenida en la simulación es del 67%.

TEORÍAS DE MEDIO EFECTIVO

Estas teorías relacionan la función dieléctrica efectiva con las funciones dieléctricas de los constituyentes. Al considerar inclusiones esferoidales prolatas, totalmente orientadas en la dirección del campo incidente, se introduce un factor geométrico dependiente de la excentricidad de la partícula, denominado factor de depolarización [1] L_z , que para esferas toma el valor de 1/3. Se considera únicamente el factor en la dirección z, debido a que la incidencia de la radiación es normal al medio efectivo y la orientación de los elipsoides se escogió en la dirección z. La fracción de volumen f_1 (aire) y f_2 (silicio), ocupada por cada una de las fases origina diferentes reglas de mezcla. Para esferas y elipsoides totalmente orientados en la dirección z, se estudian tres modelos de microestructura [2,3]. El modelo de Maxwell-Garnett es válido para estructuras de grano disperso donde una fase rodea completamente a la otra, siendo $f_2 \ll f_1$

$$\frac{\epsilon_{ef} - \epsilon_1}{L_z \epsilon_{ef} + (1 - L_z) \epsilon_1} = f \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{3L_z(\epsilon_2 - \epsilon_1) + 3\epsilon_2} \quad (1)$$

Bruggeman [3] describe medios compuestos granulados con estructuras de agregado donde $f_2 \approx f_1$, esto es

$$f_1 \frac{\epsilon_1 - \epsilon_{ef}}{L_z \epsilon_1 + (1 - L_z) \epsilon_{ef}} + f_2 \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{ef}}{L_z \epsilon_2 + (1 - L_z) \epsilon_{ef}} = 0 \quad (2)$$

¹ Email: anamaria@ciencias.unal.edu.co

Un modelo que sugiere estructuras granuladas que presentan percolación fue desarrollado por Looyenga para partículas esféricas, más tarde Lal y Parshad extendieron la fórmula a elipsoides totalmente orientados [3]

$$\varepsilon_{ef}^{(1-2L_z)} = f_1 \varepsilon_1^{(1-2L_z)} + f_2 \varepsilon_2^{(1-2L_z)} \quad (3)$$

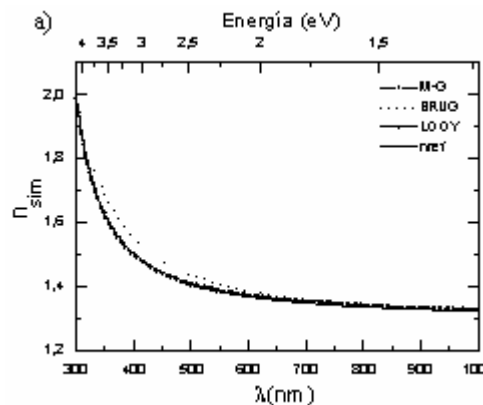
MÉTODO DE CÁLCULO

A partir de la relación general entre n_{ef} y ε_{ef} , donde ambas son cantidades complejas, se implementó una rutina de cálculo numérico para hallar ε_{ef} , y reproducir el índice de refracción efectivo del silicio poroso, al cual hemos denominado índice de referencia. Para el cálculo, $\varepsilon_1=1$ es la permitividad del aire, y la función dieléctrica del silicio $\varepsilon_2(\omega)$ se tomó siguiendo el modelo del oscilador de Wemple-DiDoménico [4]. Los parámetros que se varían en el cálculo de n_{ef} son la fracción de llenado f_2 , la excentricidad e de las partículas y el factor de amortiguamiento así como la fuerza del oscilador. Una vez obtenido n_{ef} , se reproduce y compara el espectro de reflectancia experimental, mediante la fórmula de Airy [5,6] para una película delgada homogénea absorbente (medio efectivo) sobre un sustrato. El método numérico empleado en el ajuste de la reflectancia permite además de obtener el coeficiente de absorción, determinar el espesor d de la película.

DISCUSIÓN DE RESULTADOS

La muestra se fabricó por el método de anodización electroquímica de un sustrato de silicio en solución de 25% ácido fluorhídrico (HF) + 75% alcohol isopropílico (IA), con las siguientes condiciones: $J = 0.8 \text{ mA/cm}^2$ y $t=30 \text{ min.}$, donde J y t son respectivamente la densidad de corriente y el tiempo de anodización [2,5].

El índice de refracción efectivo para esta muestra se ajustó mejor con los modelos de Maxwell-Garnett y de LLL; en la fig. (1a) se comparan los índices de refracción efectivos simulados con los tres modelos para el caso de esferoides.



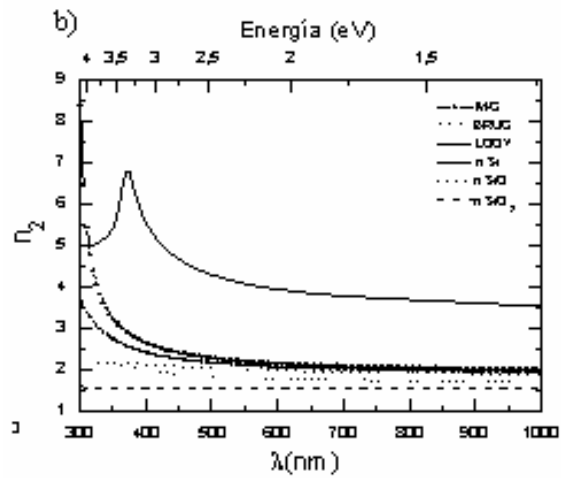


Fig. 1. Resultados obtenidos para el índice de refracción n de la muestra de silicio poroso, según los modelos de Maxwell-Garnett, Bruggeman y LLL considerando inclusiones esféricas prolatas de excentricidad 0.9. a) índice de refracción efectivo, b) Comparación del índice de refracción del SiO_2 , SiO y del silicio monocristalino con el índice de refracción de la fase sólida.

Teniendo en cuenta los procesos de oxidación que pueden sufrir las paredes de los poros después de la preparación del material [5], se comparó el índice de refracción n_2 con el de algunos óxidos de silicio reportados [6] para el rango de longitudes de onda de interés; encontrándose más similitud con estos compuestos que con el silicio monocristalino (fig.1 b).

El hecho de que las simulaciones estén arrojando índices de refracción diferentes al del silicio monocristalino para la fase sólida, indica que el modelo propuesto no tuvo en cuenta el efecto de la presencia de otros compuestos de silicio que recubren las cavidades del silicio poroso de acuerdo con las evidencias experimentales que reportan la presencia de Si-O-Si , Si-H_x ($x=1,2,3$) [7] y Si-O-H [8] entre otros.

Para esta muestra se determinó a través del cálculo que la porosidad es del 67% y el espesor de $0.586 \mu\text{m}$. El espectro de reflectancia (fig.2a) se reprodujo tomando los índices de refracción obtenidos con Maxwell-Garnett y LLL. En la fig. (2b) se presentan los espectros de absorción obtenidos utilizando los dos modelos, de ella se observa que estos valores no difieren apreciablemente en la región espectral evaluada. Las curvas del coeficiente de absorción son muy similares a las reportadas en la literatura [2].

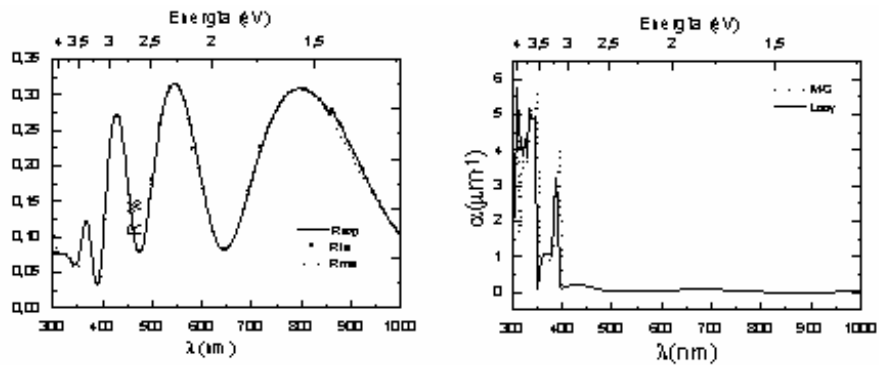


Fig. 2. a) Comparación del espectro de Reflectancia del silicio poroso, simulado a partir de los resultados obtenidos con los modelos de Maxwell-Garnett y LLL para inclusiones esféricas. b) Coeficiente de absorción, obtenido de las respectivas simulaciones en a).

CONCLUSIONES

La simulación del espectro de reflectancia experimental, utilizando las teorías de M-G, Bruggeman y LLL de medio efectivo [2,3,9] permite determinar las constantes ópticas y obtener información sobre la morfología del silicio poroso. El índice de refracción efectivo se ha modelado utilizando una geometría sencilla de partículas de silicio esféricas inmersas en una matriz de aire. Este modelo nos permite obtener características aproximadas de la microestructura del material.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue financiado por la Fundación para la Promoción de la Investigación y la tecnología del BANCO DE LA REPÚBLICA.

REFERENCIAS

- [1]. Giraldo J. Novel Superconductors and Composite Materials,(Göteborg ,1994)
- [2]. W. Theiss, Surface Science Reports 29, 91-192 (1997)
- [3]. Bánhegyi G. ,Colloid & Polymer Science 264,1030 (1986)
- [4]. Torres J. et al, Thin Solid Films **289**, 238-241 (1996)
- [5]. Properties of Porous Silicon, Leigh Canham, DERA, Malvern, UK (London, 1997)
- [6]. Palik, E. Handbook of Optical Constants of Solids Vol. 1 (Academic Press,1985)
- [7]. J. Appl. Phys. Rev. 82, 909 (1997)
- [8]. Phys. Rev. B **52** 16 (1995)
- [9]. Spanier J. E.,Herman I. P. Phys. Rev. **B** 61,15, 10437 (2000)