

УДК 538.975

В.Л. Дубов, Д.В. Фомин, Д.А. Безбабный**РАСЧЕТ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ
ТОНКИХ ПЛЕНОК Ba на Si (111)**

В статье представлены результаты расчета диэлектрической проницаемости 20 нм пленок Ba, сформированных методом реактивной эпитаксии на Si (111) 7x7, на основе их оптических спектров, полученных в видимом диапазоне.

Ключевые слова: тонкие пленки, реактивная эпитаксия, кремний, барий, диэлектрическая проницаемость.

CALCULATION OF DIELECTRIC PERMITTIVITY OF Ba on Si (111) THIN FILMS

The article presents the results of calculation of dielectric permittivity of Ba 20 nm film, made with reactive epitaxy technique on 7x7 Si (111) on the basis of their optical spectrum, which were obtained in the visible range.

Key words: thin films, reactive epitaxy, silicon, barium, dielectric permittivity.

Введение

В настоящее время во всем мире активно ведется поиск перспективных для электроники наноматериалов и исследование их электрических свойств, что связано в первую очередь с необходимостью производства методами планарной технологии новых электронных компонентов, отвечающих высоким требованиям современной промышленности. В полной мере это относится к производству эффективных фотоэлектрических преобразователей (ФЭП).

Проведенный анализ литературных источников показал, что новым материалом для ФЭП, обладающим высоким коэффициентом полезного действия, может стать BaSi_2 . В ряде работ – как теоретических [1], так и экспериментальных [2-5] – прямо говорится об этом. Одним из признаков, указывающих на это, является ширина запрещенной зоны [1, 2, 4, 5], как у дисилицида бария – 1,3 эВ. В [6] приведены данные исследований электрических свойств тонких пленок BaSi_2 в зависимости от кристаллической структуры и температуры. В [7] приведены теоретические расчеты спектров отражения, индекса преломления и проводимости для BaSi_2 , из которых видно, что дисилицид бария обладает необходимыми для производства солнечных батарей свойствами в узком диапазоне электромагнитного спектра. Поэтому важно продолжить исследование оптических спектров тонких пленок BaSi_2 , полученных экспериментально.

Цель нашей работы – исследование диэлектрической проницаемости пленок Ba, сформированных нами на Si (111) 7x7 методом реактивной эпитаксии [8], а также сравнение новых данных с ранее полученными результатами.

Эксперимент

Пленки Ва на Si были сформированы методом реактивной эпитаксии в сверхвысоковакуумной (СВВ) камере прибора РНИ model 590 с базовым давлением $1 \cdot 10^{-9}$ Торр. Осаждение велось из термического источника бария, выполненного из танталовой фольги в виде трубочки. Подложка вырезалась из промышленной шайбы КДБ-45 Si(111) и подвергалась стандартным процедурам очистки, включая высокотемпературный прогрев непосредственно в СВВ-камере. Калибровка скорости осаждения проводилась по кварцевому датчику с использованием измерителя толщины пленки Sycon Instruments. Контроль за осаждением велся с применением метода электронной оже-спектроскопии. Были получены три пленки, толщиной 20 нм каждая: № 1 при температуре кремниевой подложки $T_{Si} = 800^\circ\text{C}$, № 2 при $T_{Si} = 850^\circ\text{C}$ и № 3 – при $T_{Si} = 900^\circ\text{C}$. Образцы исследовались методами оптической спектроскопии в видимом диапазоне. На основе полученных спектров была рассчитана диэлектрическая проницаемость пленок.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены спектры отражения сформированных пленок и чистой подложки Si (111) 7×7 , полученные на спектрометре Hitachi U3010. Обработка данных проведена в программе Matlab 7.9.0.

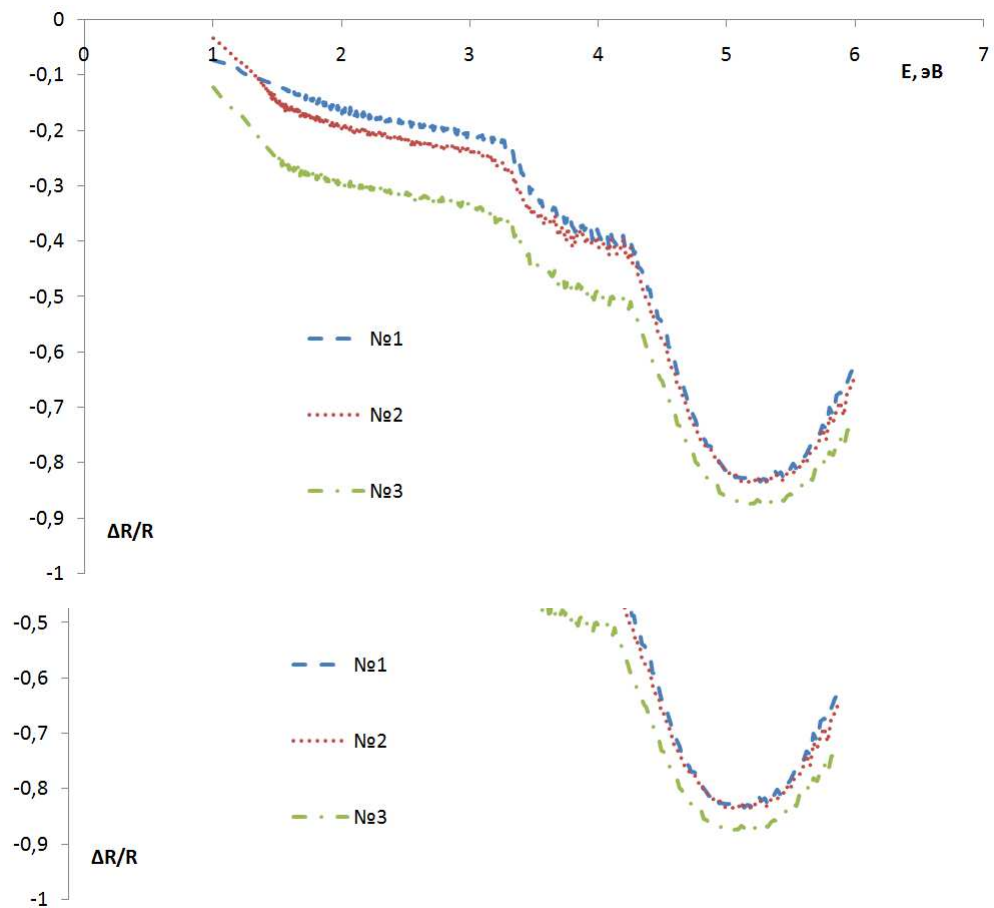


Рис. 1. Спектры отражения тонких пленок Ва, сформированных на Si (111) 7×7 при разных температурах подложки.

При анализе сформированных пленок проводился расчет дифференциальных отражательных спектров для определения особенностей образцов (рис. 2).

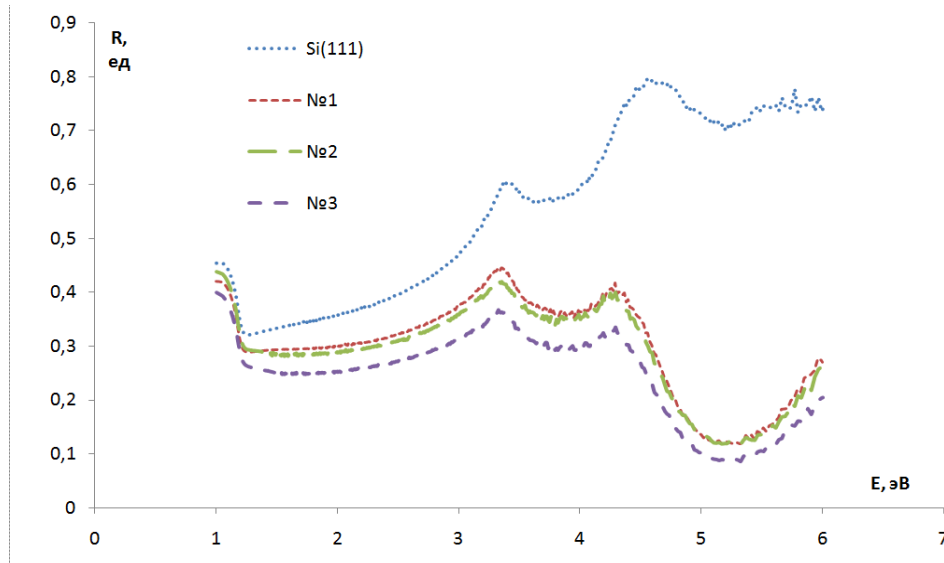


Рис. 2. Дифференциальные спектры отражения исследуемых образцов.

Расчет проводился по следующей формуле [9]:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R_a - R_0}{R_0}, \quad (1)$$

где R_0 и R_a – коэффициенты отражения от эталона, в качестве которого выступает подложка, и от подложки после осаждения адсорбата.

Дифференциальные спектры отражения позволяют выполнять расчет диэлектрической проницаемости пленки для s или p поляризованного света по формулам соответственно [10]:

$$\frac{\Delta R_s}{R_s} = \frac{8\pi d n_1 \cos(\varphi)}{\lambda} \operatorname{Im} \left(\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_1 - \varepsilon_3} \right), \quad (2)$$

$$\frac{\Delta R_p}{R_p} = \frac{8\pi d n_1 \cos(\varphi)}{\lambda} \operatorname{Im} \left\{ \left(\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_1 - \varepsilon_3} \right) \left[\frac{1 - (\varepsilon_1 / \varepsilon_2 \varepsilon_3)(\varepsilon_2 + \varepsilon_3) \sin^2(\varphi)}{1 - (1 / \varepsilon_3)(\varepsilon_1 + \varepsilon_3) \sin^2(\varphi)} \right] \right\}, \quad (3)$$

где λ – длина волны; φ – угол падения; n_1 и ε_1 – показатель преломления и диэлектрическая функция среды, в которой находится исследуемый образец (для вакуума $n_1=1$ и $\varepsilon_1=1$); ε_3 – диэлектрическая функция подложки; d – толщина исследуемой пленки, а ε_2 – ее диэлектрическая функция. Данные формулы тождественны при $\varphi=0$, при малых углах $\sin^2(\varphi) \approx 0$, поэтому выражение p поляризованного света переходит в формулу для s поляризации. Это значит, что исследование изотропной пленки как светом s-, так и p-типа поляризации при малых углах падения приводит к одному результату, при таких условиях можно применять неполяризованный свет.

Следует отметить, что диэлектрическая функция ε_1 (где $I = 1, 2, 3$) в общем случае является комплексной величиной, содержащей вещественную ε_1' и мнимую ε_1'' части: $\varepsilon_1 = \varepsilon_1' - i\varepsilon_1''$; уравнения (2, 3) разрешимы лишь в случаях равенства мнимых частей диэлектрических проницаемостей пленки и подложки. Можно предположить, что в случае малой толщины пленок дисилицида бария по сравнению с толщиной подложки их мнимые диэлектрические части примерно равны, что позволяет рассчитать диэлектрическую проницаемость нанесенных пленок. Результат представлен в виде спектров на рис. 3.

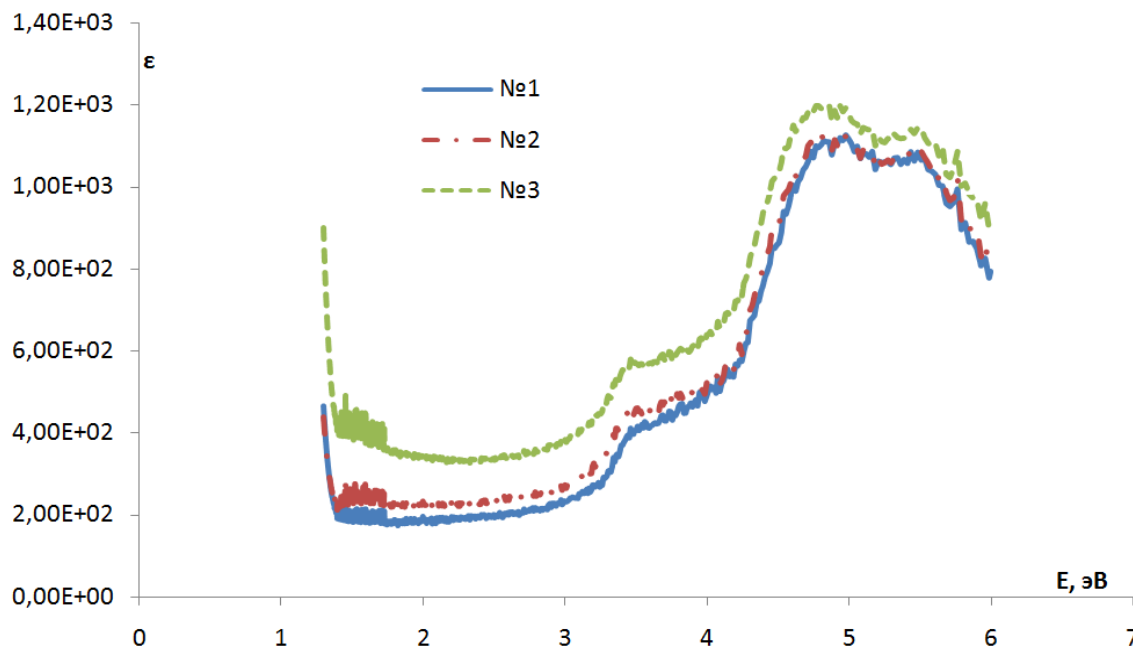


Рис. 3. Диэлектрическая проницаемость 20 нм пленок Ва, сформированных на Si (111) 7x7 при разных температурах.

Заключение

Таким образом, в данной работе были рассчитаны диэлектрические функции и построены графики их зависимостей для трех 20 нм пленок бария, сформированных на Si (111) 7x7 при разных температурах. Из полученных данных видно, что диэлектрическая проницаемость пленок значительно выше диэлектрической проницаемости кремниевой подложки. Мы связываем это с высокой шероховатостью пленок и их пористостью, а также с высокими температурами подложки, использованными при формировании пленок. Для обобщения полученных результатов требуются дополнительные исследования.

Работа выполнена при поддержке внутреннего гранта АмГУ.

1. Migas, D.B., Shaposhnicov, V.L., Borisenko, V.E. Isostructural BaSi₂, BaGe₂ and SrGe₂: electronic and optical properties // Phis. Stat. sol. – 2007. – № 7. – P. 2611-2618.

2. Morita, K., Inomata, Y., Suemasu, T. Optical and electrical properties of semiconducting BaSi₂ thin films on Si substrates grown by molecular beam epitaxy // Thin Solid Films. – 2006. – № 508. – P. 363-366.

3. Nakamura, Tomoyuki, Suemasu, Takashi, Takakura, Ken-ichiro, Hasegawa, Fumio, Wakahara, Akihiro, Imai, Motoharu. Investigation of the energy band structure of orthorhombic BaSi₂ by optical and electrical measurements and theoretical calculations // Applied physics letters. – 2002. – Vol. 81, № 6. – P. 1032-1034.

4. Matsumoto, Yuta, Tsukada, Dai, Sasaki, Ryo, Takeishi, Mitsutomo, Suemasu, Takashi. Photoresponse Properties of Semiconducting BaSi₂ Epitaxial Films Grown on Si(111) Substrates by Molecular Beam Epitaxy // Applied Physics Express. – 2009. – № 2. – P. 021101-1 – 021101-3.

5. M. Khan, Ajmal, Hara, K.O., Du, W., Baba, M., Nakamura, K., Suzuno, M., Toko, K., Usami, N., Suemasu, T. In-situ heavily p-type doping of over 10²⁰cm⁻³ in semiconducting BSi₂ thinfilms for solar cells applications // Applied physics letters. – 2013. – № 102. – P. 112107-1.

6. Takabe, Ryouta, Nakamura, Kotaro, Baba, Masakazu, Du, Weiji, Ajmal Khan, M., Toko, Kaoru, Sasase, Masato, O. Hara, Kosuke, Usami, Noritaka, Suemasu, Takashi. Fabrication and characterization of BaSi₂ epitaxial films over 1 μm in thickness on Si(111) // *Japanese Journal of Applied Physics*. – 2014. – № 53. – P. 04ER04-1- 04er04-4.
7. FengJuan, ZHAO, Quan, XIE, Qian, CHEN, ChuangHua, YANG. First-principles calculations on the electronic structure and optical properties of BaSi₂ // *Science in China Series G: Physics, Mechanics & Astronomy*. – 2009. – № 4. – P. 580-586.
8. Фомин, Д.В., Дубов, В.Л., Безбабный, Д.А. Формирование тонких пленок Ва на Si(111) и исследование их оптических свойств // *Вестник АМГУ. Серия «Естественные и экономические науки»*. – 2014. – № 67. – С. 39-42.
9. Noguez, C., Beitia, C., Preyss, W., Shkrebtii, A., Roy, M., Borensztein, Y., Del Sole, R. Theoretical and experimental optical spectroscopy study of hydrogen adsorption at Si(111)-(7x7) // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 76. – P. 4923.
10. McIntyre, J.D.E., Aspnes, D.E. Differential reflection spectroscopy of very thin surface films. // *Surface Science*. – 1971. – Vol. 24. – P. 417.