

УДК 535:530. 182:621. 372. 632

¹К.С. Секербаев, ²В.Ю. Тимошенко, ¹Т.И. Таурбаев¹Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы
²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Россия, г. Москва
E-mail: itsntoveryet@gmail.com

Влияние анизотропии формы кремниевых наноструктур на их оптические свойства

В рамках приближения эффективной среды и модели Друде-Лоренца выполнены расчеты оптических характеристик, в том числе, показателя преломления и коэффициента поглощения в спектральной области ниже края межзонного поглощения, ансамблей кремниевых нанокристаллов с различной формой и фактором заполнения пространства. Получены выражения для частотных зависимостей компонент комплексной диэлектрической проницаемости системы ориентированных эллипсоидов, нитей и слоев, найдены условия достижения максимальной оптической анизотропии при минимальных оптических потерях. Из расчетов следует, что максимальная оптическая анизотропия достигается для системы параллельных плоскостей и равна 1 при пористости 0,3. Система плоскостей ведет себя как отрицательный одноосный кристалл, а нити – как положительный одноосный кристалл. Для нитей максимальная оптическая анизотропия равна 0,65 при пористости 0,6. Коэффициент поглощения среды сильно зависит от частоты излучения и достигает максимума при частотах порядка 200 см^{-1} . Рост концентрации носителей заряда может приводить к значительному увеличению двулучепреломления и поглощения. Обсуждается применимость полученных результатов для описания оптических свойств пористого кремния и других кремниевых наноструктур.

Ключевые слова: анизотропия, двулучепреломление, поглощение, диэлектрическая проницаемость, фактор деполяризации, пористый кремний, теория эффективной среды, обобщенная формула Бруггемана.

Қ.С. Секербаев, В.Ю.Тимошенко, Т.И.Таурбаев

Кремнийлік нанокұрылымдардың пішін анизотропиясы олардың оптикалық қасиеттеріне әсер

Эффективті (тиімді) орта және Друде-Лоренц модельдің жуықталумен шектелген формасы және кеңістікті толтыру факторы әртүрлі кремнийлік нанокристалдары ансамбльдерінің оптикалық сипаттамалары есептелген, сонымен бірге зонааралық жұтуының шетінен төмен спектралдық облысындағы жұту коэффициенті есептелген. Бағытталған эллипсоидтардың жүйесіне, жіпшелердің және қабаттардың комплексті диэлектрлік өтімділіктердің жиілікті тәуелдіктеріне арналған теңдеулері табылған, минималды оптикалық шығындар кезінде максималды оптикалық анизотропияны алу үшін шарттар табылған. Есептерден шығатын нәтижелер: параллель жазықтар жүйе үшін кеуектілігі 0,3 болғанда максималдық оптикалық анизотропиясы 1-ге тең болады. Жазықтар жүйесінің ұстанымы теріс бірсызты кристалл сияқты, ал жіпшелердің ұстанымы – оң бірсызты кристалл сияқты. Кеуектілігі 0,6 болғанда жіпшелер үшін максималдық оптикалық анизотропиясы 0,65-ке тең. Органың жұту коэффициенті сәулелену жиілігінен өте күшті тәуелді болады және жиіліктері шамамен 200 см^{-1} болғанда максимумға жетеді. Заряд тасушылардың концентрациясының өсуі сәулеленің қосарланып сынуының және жұтуының аса өсуіне келтіруі мүмкін. Алынған нәтижелердің кеуек кремнийдің және басқа кремнийлік нанокұрылымдардың оптикалық қасиеттерін түсіндіру үшін қолдануы талқыланған.

Түйін сөздер: анизотропия, сәулеленің қосарланып сынуы, жұтуы, диэлектрлік өтімділік, деполяризация факторы, кеуек кремний, эффективтік (тиімді) органың теориясы, Бруггеманның жалпыланған формуласы.

K. S. Sekerbayev , V. Yu. Timoshenko , T. I. Taurbayev

Influence of the form anisotropy of silicon nanostructures on their optical properties

Within a framework of approaching the effective media and Drude-Lorenz Model, the calculations of the optical characteristics, which include the refraction index and absorbability in the spectral region below the end of band-to-band absorption, assemblies of silicon nano crystals with various form and space-filling factor, have been done. The

expressions for frequency profiles of components of the complex dielectric constant of the system of the oriented ellipsoids, wires and layers, have been achieved, and the conditions for reaching the maximal optical anisotropy with minimal optical losses have been found. It follows from the calculations that maximal optical anisotropy is achieved for the system of parallel planes, and equals to 1 when having porosity equal to 0.3. The system of planes acts as the negative uniaxial crystal, and the wires – as positive uniaxial crystal. The maximal optical anisotropy for the wires is equal to 0.65 when having porosity equal to 0.6. Absorbability of medium strongly depends on emission frequency and achieves its maximum when having frequencies about 200 cm^{-1} . Increase of charge carrier concentration can result in significant increase of birefringence and absorption. Applicability of the achieved results for describing the optical properties of porosilicon and other silicon nanostructures is discussed.

Key words: anisotropy, birefringence, absorption, dielectric constant, scrambling factor, porosilicon, effective medium theory, Bruggeman generalized formula.

Введение

В современной микроэлектронике и фотовольтаике широко используются различные формы химически чистого кремния (кристаллический, микрокристаллический, аморфный). Однако, вследствие изотропии оптических свойств всех указанных выше разновидностей кремния, их использование в фотонике ограничено. В то же время, не так давно было обнаружено, что кремниевые наноструктуры, в частности, так называемый пористый кремний, могут обладать анизотропными оптическими свойствами [1,2]. Было установлено, что такая анизотропия, в том числе, двулучепреломление и дихроизм, в инфракрасной области спектра могут быть описаны в рамках приближения эффективной среды по обобщенной формуле Бруггемана с учетом взаимодействия с подвижными носителями заряда по модели Друде-Лоренца [3]. Несмотря на то, что с момента обнаружения сильного двулучепреломления в пористом кремнии прошло уже более 10 лет и опубликовано много экспериментальных работ и обзоров [4], многие вопросы, связанные с теоретическим описанием оптической анизотропии в кремниевых наноструктурах изучены мало. В частности, практически не исследованы условия достижения максимальной величины двулучепреломления в кремниевых наноструктурах с учетом минимизации оптических потерь. Последнее особенно важно для практического использования оптической анизотропии кремниевых наноструктур в фотонике, нанофотонике и терагерцевой оптике. В данной нашей работе проводится теоретическое исследование анизотропных свойств (двулучепреломление и дихроизм) кремниевых наноструктур и обсуждается применимость полученных результатов для описания свойств пористого кремния.

1. Методика проведения расчётов

Рассмотрим наноструктуры в виде системы (ансамбля) ориентированных эллипсоидов, для которых статистически равновероятны все компоненты (фазы), составляющие систему. Для такой среды, в спектральной области длин волн много больших характерных размеров эллипсоидов, применима теория эффективной среды и эффективная диэлектрическая проницаемость дается обобщенной формулой Бруггемана [4]:

$$\sum_{j=1}^N f_j \frac{\epsilon_{eff} - \epsilon_j}{\epsilon_{eff} + L_j(\epsilon_j - \epsilon_{eff})} = 0, \quad (1)$$

где ϵ_j , f_j и L_j – диэлектрическая проницаемость, фактор заполнения пространства и фактор деполяризации для j -той среды (фазы), ϵ_{eff} – эффективная диэлектрическая проницаемость среды, а фактор заполнения удовлетворяет условию нормировки:

$$\sum_{j=1}^N f_j = 1. \quad (2)$$

Для эллипсоидов вращения фактор деполяризации в случае направления электрического поля вдоль оси вращения дается выражением [4]:

$$L_{\parallel} = \frac{1}{1-p^2} \left(1 - p \frac{\arcsin(\sqrt{1-p^2})}{\sqrt{1-p^2}} \right), \quad (3)$$

где p – отношение полуосей эллипсоида вращения. Фактор деполяризации для направления электрического поля перпендикулярно оси вращения может быть найден из условия [4]:

$$L_{\parallel} + 2L_{\perp} = 1. \quad (4)$$

С помощью формул (3) и (4) можно легко получить значения фактора деполяризации в частных случаях плоско-параллельных слоев и

нитей-цилиндров, которые можно представить как предельные случаи эллипсоида вращения при значении $p \rightarrow 0$ (слои, $L_{\parallel} = 1, L_{\perp} = 0$) и

$p \rightarrow \infty$ (цилиндр, $L_{\parallel} = 0, L_{\perp} = \frac{1}{2}$). Эти и другие простейшие случаи схематично показаны на рис. 1.

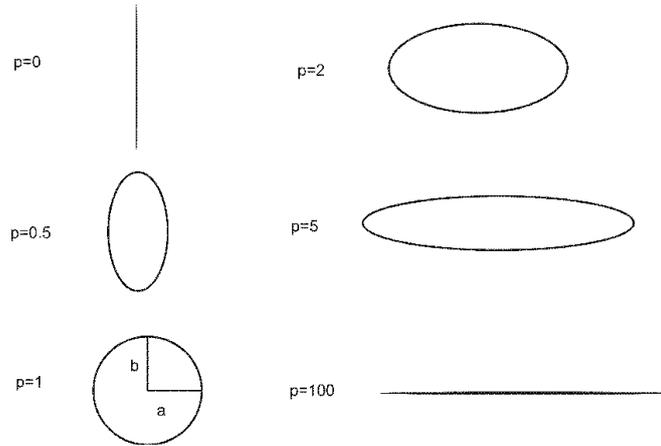


Рисунок 1 – Схематичное изображение формы наноструктур при различных отношениях полуосей эллипсоида вращения ($p=a/b$)

В простейшем случае пористого кремния можно ограничиться рассмотрением двух сред, а именно, полупроводниковой фазы (кремни-

вых нанокристаллов) и диэлектрической фазы (воздух или вакуум), и формулу (1) можно записать в следующем виде:

$$f \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_1}{\varepsilon_{eff} + L_1} + (1 - f) \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_2}{\varepsilon_{eff} + L_2} = 0, \tag{5}$$

где f имеет смысл пористости среды, то есть, объемной доли пространства, занимаемой порами.

В случае пористого кремния, находящегося на воздухе или в вакууме можно принять

$\varepsilon_1 = 1$, а для кремниевых нанокристаллов в спектральной области ниже края межзонного поглощения значение ε_2 может быть описано классической моделью Друде-Лоренца [3]:

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\tau^{-1}}, \tag{6}$$

где ε_{∞} – высокочастотная диэлектрическая проницаемость ($\varepsilon_{\infty}=11.7$ для кристаллического кремния c-Si), ω_p – плазменная частота колебаний, τ – время релаксации по импульсу, ω – частота падающего излучения.

Далее из уравнений (1) - (6) можно рассчитать значения показателя преломления для необыкновенного и обыкновенного лучей согласно следующим соотношениям [4]:

$$n_{o,e} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\operatorname{Re} \varepsilon_{eff}^{||,\perp} + \sqrt{\operatorname{Re} \varepsilon_{eff}^{||,\perp 2} + \operatorname{Im} \varepsilon_{eff}^{||,\perp 2}} \right)}, \tag{7}$$

где n_o и n_e соответствуют компонентам тензора $\varepsilon_{eff}^{||}$ и $\varepsilon_{eff}^{\perp}$, которые должны в свою очередь рассчитываться, используя значения факторов деполяризации $L_{||}$ и L_{\perp} . Для простоты описания свойств пористого кремния обычно полагают одинаковую анизотропию формы кремниевых нанокристаллов и пор: $L_1 = L_2$.

Коэффициенты поглощения света для обычного луча и необыкновенного лучей (α_o и α_e) рассчитывались с использованием стандартного выражения:

$$\alpha_{o,e} = \frac{\omega \operatorname{Im} \varepsilon_{eff}^{||,\perp}}{c n_{o,e}}. \quad (8)$$

Для анализа вклада подвижных носителей заряда расчётов выбирались следующие значения концентраций электронов и дырок N_p : от 10^{15} до 10^{20} $1/\text{см}^3$. Фактор заполнения пространства (пористость) кремниевыми наноструктурами изменялся в диапазоне от 0 до 1 (от 1 до 0). Диапазон выбранных частот: от 1 см^{-1} до 30000 см^{-1} .

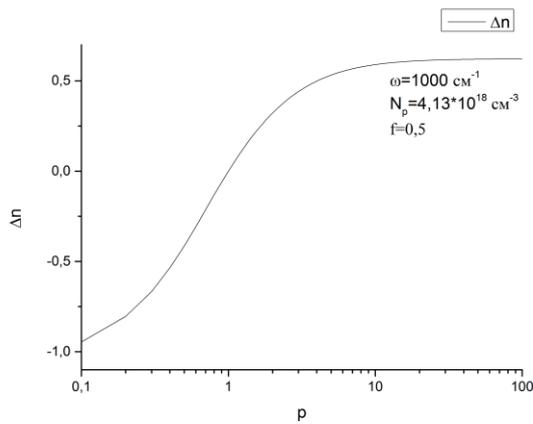


Рисунок 2 – Зависимость разницы показателей преломления n_e и n_o от отношения полуосей эллипсоида вращения p

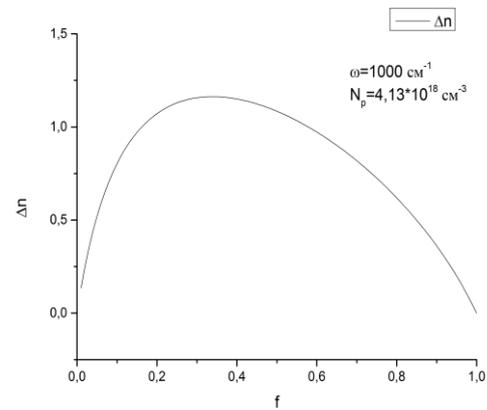


Рисунок 3 – Зависимость разницы показателей преломления n_e и n_o системы плоскопараллельных слоев от пористости f

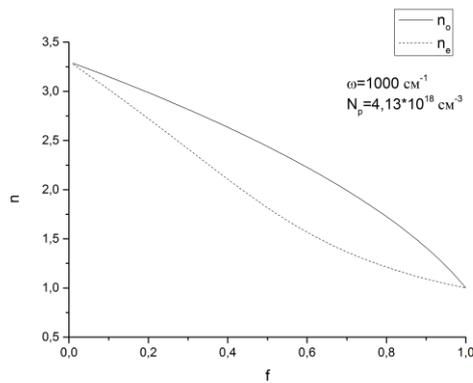


Рисунок 4 – Зависимость показателей преломления n_e и n_o нанонитей от пористости f

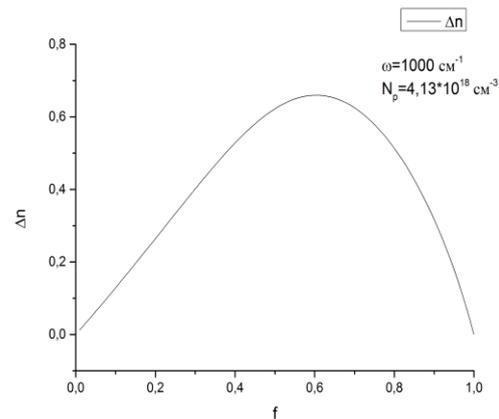


Рисунок 5 – Зависимость разницы показателей преломления n_e и n_o нанонитей от пористости f

2.Результаты и их обсуждение

В результате моделирования критических свойств установлено, что максимальная величина двулучепреломления, определяемая как абсолютная разность значений показателей преломления $\Delta n = n_e - n_o$, достигается для наноструктур в виде системы параллельных плоскостей. Отрицательный знак двулучепреломления говорит о том, что параллельные плоскости ведут себя, как отрицательный одноосный кристалл с максимальной величиной двулучепреломления порядка 1 (рис. 2). Максимальная величина двулучепреломления для системы плоскостей достигается при значении пористости 0,3 (рис. 3). При больших значениях пористости в структуре остается только воздух, при малых – кремний, вследствие чего материал становится изотропным.

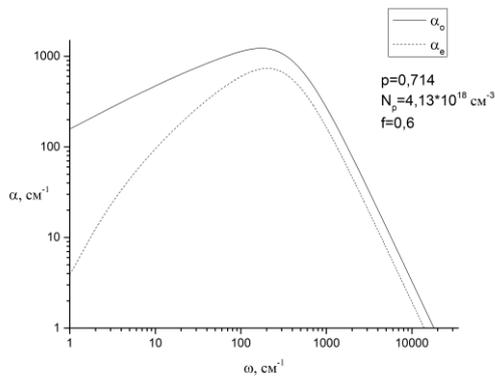


Рисунок 6 – Зависимость коэффициента поглощения среды для обыкновенного (α_o) и необыкновенного лучей (α_e) от частоты падающего излучения

В то же время для структур кремниевых нанонитей достигается величина двулучепреломления 0,65 при пористости 0,6. Нанонити ведут себя, как положительный одноосный кристалл (рис. 4, 5).

Коэффициент поглощения среды сильно зависит от частоты излучения и достигает максимума при частотах порядка 200 cm^{-1} (рис. 6).

Обнаружено, что рост концентрации носителей заряда может приводить к значительному увеличению двулучепреломления и поглощения (рис 6, 7). С увеличением концентрации свободных носителей зарядов увеличиваются значения двулучепреломления и поглощения. Максимум поглощения смещается в сторону высоких частот с повышением концентрации свободных носителей заряда.

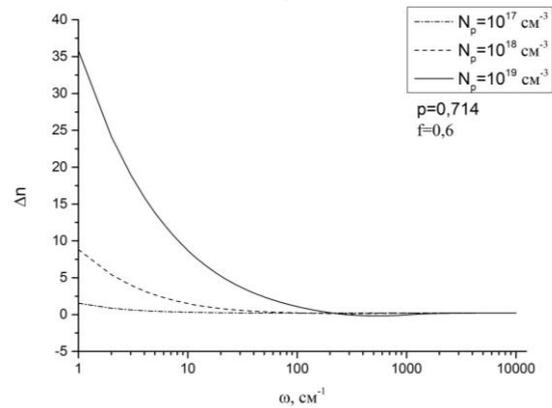


Рисунок 7 – Зависимость разницы показателей преломления n_e и n_o от частоты падающего излучения при разных концентрациях свободных носителей заряда.

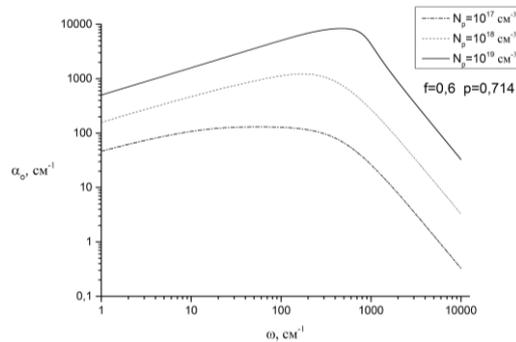


Рисунок 8 – Спектральные зависимости коэффициента поглощения обыкновенного луча (α_o) при разных концентрациях свободных носителей заряда

Заключение

Таким образом, были исследованы условия сильной анизотропии в кремниевых наноструктурах. Установлено, что рост концентрации носителей заряда до значений порядка 10^{17} – 10^{18} см^{-3} может приводить к значительному увеличению двулучепреломления. При этом коэффициент поглощения среды сильно зависит от частоты излучения и достигает максимума при частоте порядка 200 см^{-1} . Получен-

ные результаты можно использовать для выбора параметров тонких слоев нанопористого кремния или кремниевых нанонитей для использования в качестве поляризаторов и модуляторов интенсивности оптического излучения в средней и дальней ИК областях спектра. Последнее особенно актуально в связи с бурным развитием терагерцовой оптики для анализа биологических систем и обеспечения общественной безопасности.

Работа была поддержана грантами Министерства образования и науки РК 1135/ГФ, 2539/ГФЗ.

References

- 1 Kovalev D., Polisski G., Diener J., Heckler H., Kunzner N., Timoshenko V.Y., Koch F. Strong in-plane birefringence of spatially nanostructured silicon // Applied Physics Letters. - 2001, v.78(7), pp.916–918.
- 2 Kunzner N., Kovalev D., Diener J., Gross E., Timoshenko V.Y., Polisski G., Koch F., Fujii M.. Giant birefringence in anisotropically nanostructured silicon // Optics Letters. – 2001, v.26(16), pp.1265–1267.
- 3 Timoshenko V.Yu., Osminkina L.A., Efimova A.I., Golovan L.A., Kashkarov P. K. // Phys.Rev.B, 2003, v.67, pp.113405.
- 4 Golovan L.A., Timoshenko V. Yu., Kashkarov P.K. Opticheskie svoystva nanokompozitov na osnove poristyh system // Uspehi fizicheskikh nauk, 2007, t.177(6), p.619–638.