



UDK: 0538 (958)

Кувондик ДОВРАНОВ,

Базовый докторант Каршинский государственный университет

E-mail: quvondiqdavronm@gmail.com

Доцент Санкт-Петербургского политехнического университета, кандидат технических наук В.В.Лобода

MEASUREMENT OF THE BAND GAP USING THE SPECTROSCOPY METHOD OF THIN FILMS

Annotation

The properties of thin film silicides and semiconductor silicon films have been studied by IR spectroscopy and UV spectroscopy. At present, silicon-based heterostructured nanocomposites are of great interest. Despite the fact that silicon semiconductor films (crystalline, polycrystalline, amorphous) have been systematically studied for a long time, heterostructural films are new materials, the study of which began relatively recently.

The band gap energy was determined using infrared and ultraviolet spectroscopy of heterostructured $\text{Mn}_4\text{Si}_7/\text{Si}(111)$, $\text{CrSi}_2/\text{Si}(111)$, and $\text{CoSi}_2/\text{Si}(111)$ thin films. Absorption, transmission, and diffuse reflectance spectra were obtained using FT-IR spectroscopy instruments and a UV spectrophotometer. The thickness of a layer of a thin film was measured. The band gap calculated from the transmission spectra was in the range of 0.32–1.31 eV for films deposited on silicon substrates and in the range of 0.36–1.25 eV for glass substrates.

Key words: IR transmission, UV absorption, Kubelka-Munk, band gap, thin films.

ИЗМЕРЕНИЕ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ ТОНКИХ ПЛЕНОК

Аннотация

Методами ИК-спектроскопии и УФ-спектроскопии изучены свойства тонкопленочных силицидов и пленок полупроводникового кремния. В настоящее время большой интерес вызывают гетероструктурированные наноконпозиты на основе кремния. Несмотря на то, что кремниевые полупроводниковые пленки (кристаллические, поликристаллические, аморфные) систематически изучаются давно, гетероструктурные пленки являются новыми материалами, изучение которых началось сравнительно недавно.

Энергия запрещенной зоны определялась с помощью инфракрасной и ультрафиолетовой спектроскопии гетероструктурированных тонких пленок $\text{Mn}_4\text{Si}_7/\text{Si}(111)$, $\text{CrSi}_2/\text{Si}(111)$ и $\text{CoSi}_2/\text{Si}(111)$. Спектры поглощения, пропускания и диффузного отражения были получены с помощью приборов FT-IR-спектроскопии и УФ-спектрофотометра. Измерялась толщина слоя тонкой пленки. Ширина запрещенной зоны, рассчитанная по спектрам пропускания, находилась в диапазоне 0,32–1,31 эВ для пленок, нанесенных на кремниевые подложки, и в диапазоне 0,36–1,25 эВ для стеклянных подложек.

Ключевые слова: ИК-пропускание, УФ-поглощение, Кубелка-Мунк, запрещенная зона, тонкие пленки.

YUPQA PLYONKALARNING SPEKTROSKOPIYA USULIDAN FOYDALANGAN HOLDA TAQIQLANGAN ZONA KENGLIGINI O'LCHASH

Annotatsiya

Yupqa plyonkali silisidlar va yarim o'tkazgichli kremniy plyonkalarining xususiyatlari IQ spektroskopiyasi va UV spektroskopiyasi bilan o'rganilgan. Hozirgi vaqtda kremniy asosidagi geterostrukturali nanokompozitlar katta qiziqish uyg'otmoqda. Kremniy yarimo'tkazgich plyonkalari (kristalli, polikristalli, amorf) uzoq vaqt davomida tizimli ravishda o'rganilganiga qaramay, geterostrukturali plyonkalar yangi materiallar bo'lib, ularni o'rganish nisbatan yaqinda boshlangan. Taqiqlangan zona energiyasi geterostrukturali $\text{Mn}_4\text{Si}_7/\text{Si}(111)$, $\text{CrSi}_2/\text{Si}(111)$ va $\text{CoSi}_2/\text{Si}(111)$ yupqa plyonkalarining infraqizil va ultrabinafsha spektroskopiyasi yordamida aniqlandi. FT-IR spektroskopiya qurilmasi va UV spektrofotometri yordamida yupqa plyonkalarining yutilish, o'tkazish va diffuz aks ettirish spektrlari olindi. Yupqa plyonka qatlamining qalinligi o'lchandi. Yutilish va o'tkazish spektrlaridan hisoblangan taqiqlangan zona energiyasi kremniy substratlarga yotqizilgan plyonkalar uchun 0,32-1,31 eV oralig'ida va shisha tagliklar uchun 0,36-1,25 eV oralig'ida edi.

Kalit so'zlar: IQ-o'tkazish, UV-yutilish, Kubelka-Munk, taqiqlangan zona kengligi, yupqa plyonkalar.

Введение. Прямая оптическая ширина запрещенной зоны полупроводников традиционно измеряется путем экстраполяции линейного участка кривой поглощения, возведенного в квадрат к оси абсцисс, и разработана Тауком. Вариант этого разработанного метода также широко используется.

Наноразмерные модификации пленок силицидов металлов представляют интерес как функциональные материалы для нанофотоники, оптоэлектроники, ИК-детекторов [1]. Важным ключевым параметром, определяющим оптические свойства материала, является ширина запрещенной зоны. Наиболее распространенным способом

получения этого параметра является использование данных из спектра поглощения. Однако в ряде случаев прямое измерение оптического поглощения затруднено из-за особенностей строения образцов. Основной целью данной работы является реализация альтернативного метода определения значения пробега тонких пленок $\text{Mn}_4\text{Si}_7/\text{Si}(111)$, $\text{CrSi}_2/\text{Si}(111)$ и $\text{CoSi}_2/\text{Si}(111)$ на основе анализа спектров отражения.

Экспериментальные измерения инфракрасного поглощения могут быть выполнены с использованием ИК-спектрофотометра дисперсионного типа или инфракрасного спектрофотометра с преобразованием Фурье интерференционного типа (FT-IR). Дисперсионные инструменты имеют ограничения, связанные с небольшой пропускной способностью и длительным временем сканирования. Компьютеризированный FT-IR очень удобен, быстр и позволяет получить большое количество спектров, усредненных по сканированию. Коммерческие приборы предоставляют программное обеспечение для измерения многих параметров, таких как пиковые значения, пики, спектры вычитания и т. д. [2]. Эффект квантового размера проявляется в этом материале даже в кристаллах размером в несколько десятков нанометров из-за малой эффективной массы возбужденной электронно-дырочной пары. Квантовые точки нанопленок $\text{Mn}_4\text{Si}_7/\text{Si}(111)$, $\text{CrSi}_2/\text{Si}(111)$ и $\text{CoSi}_2/\text{Si}(111)$ очень привлекательны для оптоэлектронных устройств среднего инфракрасного диапазона, таких как фотонные детекторы. Он используется в качестве материала мишени в инфракрасных датчиках, решетках и различных оптоэлектронных устройствах [3].

Литературный обзор. Кубелка-Мунк [4] и Кумар [5] изучали его на различных химических соединениях и измеряли ширину запрещенной зоны по инфракрасным и ультрафиолетовым спектрам неорганических веществ.

Методология исследования. С помощью молекулярного турбонасоса (Pfeiffer vacuum) в камере магнетронного прибора EPOS-PVD-DESK-PRO создавался высокий вакуум при давлении 10-6 Торр. Сначала поверхность прозрачных стеклянных и кремниевых пластин была механически очищена 20% разбавленной плавиковой кислотой, затем поверхность стекла и кремния была повторно очищена путем ионизации газов аргона внутри камеры с помощью «ионной пушки» очистное устройство, установленное в камере магнетрона. Ток от источника питания магнетрона 657 мА, мощность 221 Вт, напряжение 336 В. С помощью турбомолекулярного насоса в камеру всасывался воздух до достижения давления 10-5 Торр. Сначала были созданы тонкие пленки $\text{Mn}_4\text{Si}_7/\text{Si}(111)$, $\text{CrSi}_2/\text{Si}(111)$ и $\text{CoSi}_2/\text{Si}(111)$ различной толщины при комнатной температуре методом «ион-плазма».

Для получения спектров поглощения, пропускания и диффузного отражения использовали спектрофотометр UV-1900i и метод Нарт-Ханзел спектрофотометра IRTracer-100 тонких пленок, полученных «ионно-плазменным» методом [6]. Одно из аналитических устройств, IRTracer-100, имеет уникальную особенность, заключающуюся в том, что его можно использовать в дополнение к существующим аксессуарам, таким как устройство ослабленного полного отражения с одним отражателем и устройство диффузного отражения, а также аксессуары для измерения пропускания, такие как съемный КВг.

В данной работе всесторонне исследовано влияние материалов подложки на физические свойства осаждаемых тонких пленок $\text{CrSi}_2/\text{Si}(111)$. В этом исследовании использовались две подложки, а именно стеклянные пластины (подложка) и пластины из чистого кремния (подложка). В результате пробы ионно-плазменным методом в условиях высокого вакуума появляются тонкие слои силицида хрома. Прямая оптическая ширина запрещенной зоны тонких пленок измеряется путем экстраполяции линейного участка квадрата кривой поглощения на ось абсцисс и была разработана Кубелкой-Мунк. Вариант этого разработанного метода также широко используется.

Анализ и результаты. Спектры диффузного отражения и параметры энергетической структуры.

Определение ширины запрещенной зоны тонких пленок очень важно для повышения чувствительности оптоэлектронных устройств и прогнозирования их качественных характеристик. Например, наиболее часто используемыми методами измерения являются измерения пропускания тонких пленок или спектроскопические методы, основанные на поглощении. Эти методы предпочтительнее для измерения оптических и некоторых электрофизических свойств материалов, так как в основном они основаны на расчете глубины проникновения фотонов в энергетический диапазон запрещенной зоны полупроводников [7]. Благодаря глубине проникновения фотонов в тонкие пленки можно определить ширину дырочной или электронной проводимости в них по энергии фотонов. При определении оптической ширины запрещенной зоны наноразмерных образцов необходимо учитывать некоторые переменные ширины полосы. С помощью метода ИК-спектроскопии измеряются такие параметры, как энергия фотона ($h\nu$), волновое число (k), функция отражения поглощения ($F(R)$) и коэффициенты поглощения и рассеяния (K, S).

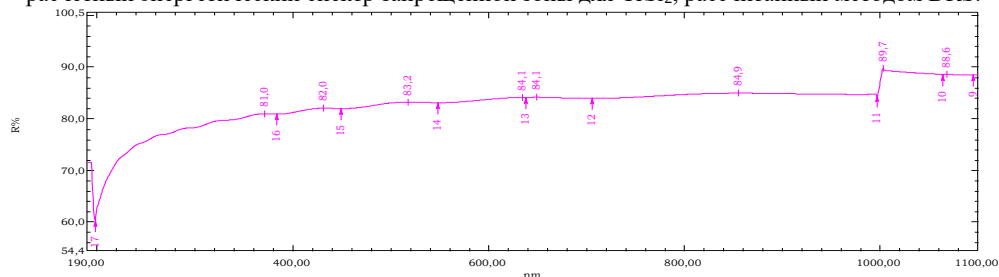
При экспериментальном определении ширины запрещенной зоны тонких пленок общепринятой практикой является сначала преобразование спектров пропускания в спектры псевдопоглощения $F(R)$ с помощью преобразования Кубелки-Мунка [4]:

$$F(R) = \frac{K}{S} = \frac{(1-R)^2}{2R} \quad (1)$$

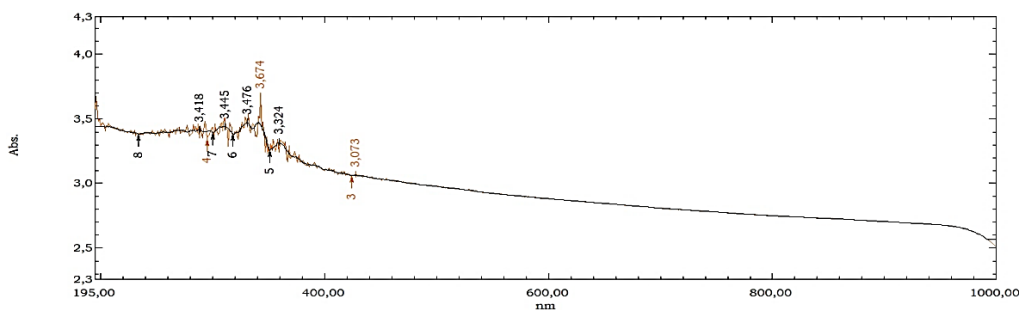
здесь R — коэффициент отражения образца, K и S — коэффициенты поглощения и рассеяния соответственно.

Спектры, полученные методом диффузного отражения, отличаются от стандартных спектров пропускания. Спектры могут быть преобразованы в единицы Кубелки-Мунка, что компенсирует различия. На рис. 2 показан

расчетный энергетический спектр запрещенной зоны для CrSi₂, рассчитанный методом DRS.



а



б

Рисунок 1. Спектр диффузного отражения а-кремния, спектр поглощения тонкой пленки б-силицида марганца

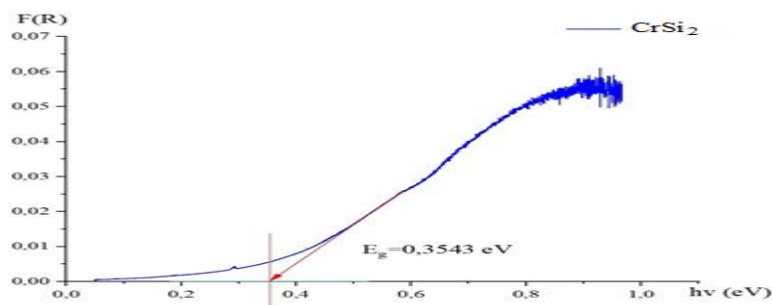


Рисунок 2. Зависимость функции отражения поглощения от энергии фотонов

Коэффициент рассеяния зависит как от размера частиц, так и от упаковки образца, что объясняет важность подготовки образца для получения точных результатов. Чтобы выполнить преобразование Kubelka-Munk, выберите “Kubelka-Munk” в меню программы FTIR. Для этого нет параметров для настройки. Уравнение Кубелки-Мунка создает линейную зависимость спектральной интенсивности от концентрации образца.

Энергия структуры глотание спектры и параметры.

Спектральные зависимости коэффициента поглощения $\alpha(h\nu)$ рассчитывали по следующим аналитическим уравнениям и формулам, рекомендованным Кубелкой-Мунком и Кумаром [5]:

$$\alpha(h\nu) = \frac{\ln\left(\frac{R_{max}-R_{min}}{R(h\nu)-R_{min}}\right)}{2 \cdot d} \quad (2)$$

здесь R_{max} и R_{min} отражение продолжать максимум и минимальные значения, d - поглощение слой толщина.

$$\alpha(h\nu) \cdot h\nu = A \cdot (h\nu - E_g)^n \quad (3)$$

здесь A — постоянная, E_g - ширины запрещенной зоны, n - показатель, определяющий тип межзонных переходов (1/2; 3/2; 2 и 3 прямо и косвенно разрешены и запрещены соответственно для переходов).

Ограниченные информацией об энергетической структуре и характере межзвездных переходов в пленке CrSi₂, мы аппроксимировали данные по поглощению, полученные по моделям Кумара и Кубелки-Мунка, уравнением (3), задав параметр n в качестве переменной. Наилучшее соответствие (коэффициент корреляции 0,986) было достигнуто при значениях 2 и 2,5 для CrSi₂.

Для получения значений энергии запрещенной зоны мы проанализировали спектральные зависимости определяемого поглощения с использованием подходов Кубелки-Мунка и Кумара в координатах не прямых оптических переходов (рис. 2 и рис. 3).

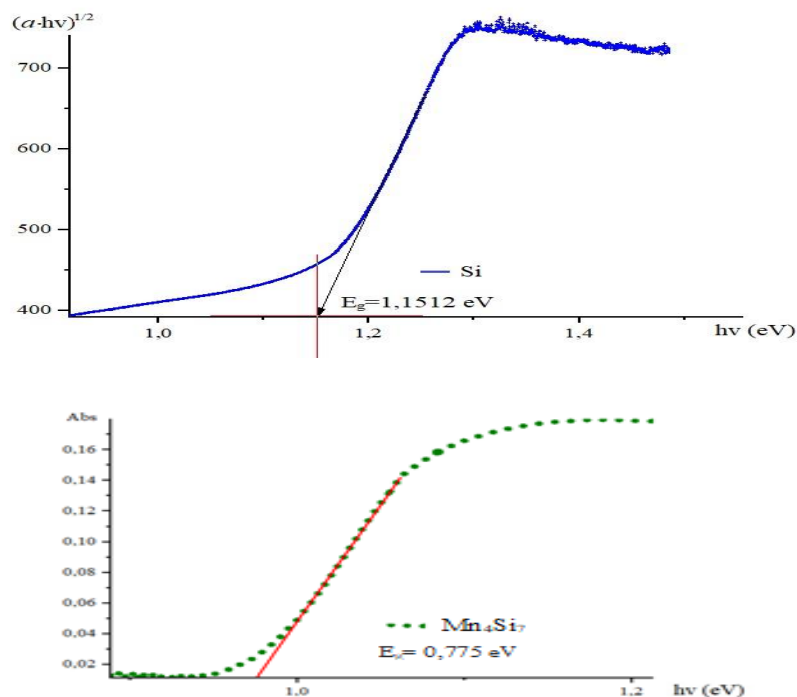


Рисунок 3. Спектры косвенных переходов, измеренные по функции Кубелки-Мунка

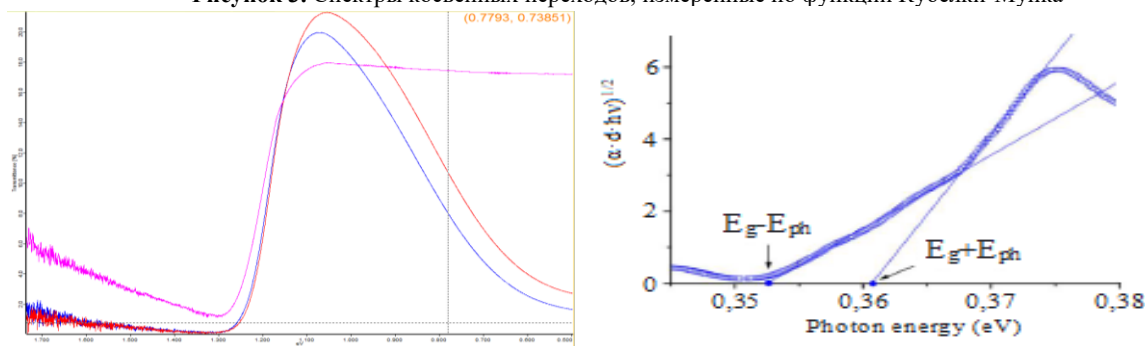


Рисунок 4. Значения энергетической щели с поглощением и испусканием фононов (E_{ph}) по модели Кумара для силицида марганца

Аппроксимация линейного участка в спектральной зависимости функции К-М прямой линией до пересечения с осью абсцисс равна 1 соответственно для тонких Si(111), $Mn_4Si_7/Si(111)$ и $CrSi_2/Si(111)$. 1,512 эВ, 0,773 эВ и 0,3543 эВ для энергий запрещенной зоны для не прямых переходов.

Более сложные особенности наблюдаются при использовании модели Кумара (рис. 3). Спектр поглощения характеризуется двумя линейными участками. Координаты точек пересечения с осью энергии соответствуют значениям $E_g + E_{ph}$ и $E_g - E_{ph}$, где E_g – энергетический зазор между максимальной и минимальной зонами проводимости валентной зоны, E_{ph} – не прямая оптическая энергия вовлеченных фононов. в переходе [8]. Другими словами, существует два типа непрямого перехода: поглощение и испускание фононов. На рис. 4 показано схематическое изображение этих переходов. Полученные значения энергетической щели и энергии фононов для тонких пленок Si(111), $CrSi_2/Si(111)$ и $Mn_4Si_7/Si(111)$ сведены в таблицу 1.

Таблица 1.

Метод \ Образец	Si (111)	$CrSi_2/Si(111)$	$Mn_4Si_7/Si(111)$
	E_g (эВ)	E_g (эВ)	E_g (эВ)

Кубелка - Мунк	1,1512	0,3543	0,773
Кумар модель	1,132	0,362	0,684

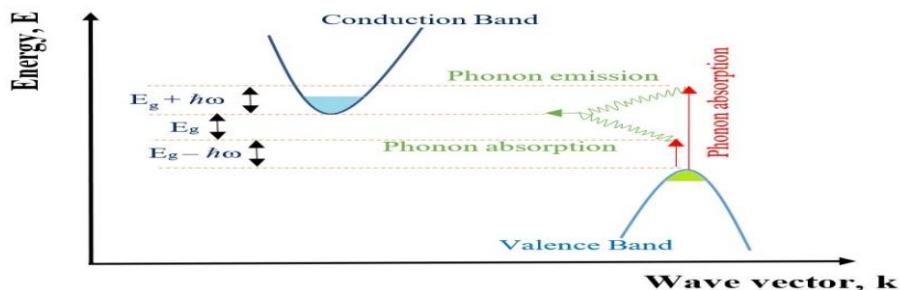


Рисунок 5. Схематическое изображение непрямых межзонных переходов с поглощением и испусканием фононов в тонких пленках, полученных ионно-плазменным методом

Закключение. В данной работе были измерены ширина запрещенной зоны (E_g) и энергия фононов тонких пленок с гетероструктурированными тонкими пленками, полученными в условиях высокого вакуума ионно-плазменным методом с использованием методов ИК-Фурье и УФ-спектроскопии поглощения. Определения энергетической щели для непрямых переходов 1,1512 эВ, 0,773 эВ и 0,3543 эВ для тонких пленок Si(111), $Mn_4Si_7/Si(111)$ и $CrSi_2/Si(111)$ соответственно разрешены. Из результатов видно, что нами показан подход к определению спектральных характеристик центров поглощения, типов межзонных переходов и величин запрещенной зоны для тонкослойных пленок, сформированных методом магнетронного распыления, на основе данных спектров отражения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тамракар Р.К., Бисен Д.П., Брахме Н. Рез. Хим. Промежуточный. № 40. 1771-1779 гг. 2014.
2. Анишур Рахман АТМ., Василев К., Маевски П. Журн. Коллоид. Интерф. науч. 354. С. 592-596. 2011.
3. Зацепин А.Ф., Кузнецова Ю.А., Спаллино Л. и др. Energy Proc. 102 с. 144-151. 2016.
4. Normuradov M.T., Dovranov Q.T., Davronov X.T. QarDU xabarlar. №(4/1)54.C.27-31
5. Dovranov K., Davranov Kh., Doniyorova I., Turaqulov H. Infrared analysis of thin films. «Young Scientist». № 52 (447). Pp. 1-3. 2022.
6. Kubelka P., Munk F. Journ. Tech. Phys. 12. 593. 1931.
7. Кумар В., Шарма Т.П., Сингх В. Опт. Мэтр 12. pp. 115–119. 1999.
8. Вакаки М., Сибуя Т., Кудо К. Физические свойства и данные оптических материалов (CRC Press Taylor Francis Group). 2007.