

ОПТИЧЕСКИЕ ПОСТОЯННЫЕ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ В ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ КВАНТОВ 70—400 эВ

Е. О. Филатова, А. С. Виноградов, И. А. Сорокин, Т. М. Зимкина

Оптические постоянные (показатель преломления n и линейный коэффициент поглощения μ) монокристаллического кремния в области энергий квантов 70—400 эВ рассчитаны из экспериментальных спектров отражения с помощью дисперсионного соотношения Крамерса—Кронига. Обнаружено, что общий вид спектральных зависимостей μ и n по числу деталей структуры и их энергетическому положению слабо зависит от того, какой из спектров отражения (4, 8 или 12°) использовался в расчете. Заметное увеличение рассчитанных коэффициентов поглощения μ при возрастании скользкого угла падения от 4 до 12° связывается с ростом глубины проникновения излучения в кремний и соответствующим увеличением средней плотности вещества в отражающем приповерхностном слое. При сравнении спектров поглощения — рассчитанного из данных по отражению и полученного методом прямого фотопоглощения — отмечаются идентичность тонкой структуры и наличие сильных различий в интенсивности деталей структуры. Анализируются возможные причины такого несоответствия. Указывается на существование в районе $L_{2,3}$ -края поглощения области аномальной дисперсии показателя преломления, где $n > 1$.

Известно, что оптические исследования в видимой и ультрафиолетовой областях спектра дают много ценных сведений об энергетической структуре твердых тел [1]. Не менее интересная информация, вероятно, может быть получена и при изучении процессов взаимодействия квантов ультрамягкого рентгеновского излучения с твердыми телами и анализа спектрального поведения оптических постоянных в этом диапазоне электромагнитного излучения [2]. К сожалению, такие исследования практически отсутствуют. Основная цель данной работы — получение оптических постоянных монокристаллического кремния на основе анализа с использованием дисперсионного соотношения Крамерса—Кронига ультрамягкого рентгеновского спектра отражения кремния в области $L_{2,3}$ ($2p$)-края поглощения, который был исследован нами ранее [3].

На рис. 1 приведены спектральные зависимости коэффициента отражения $R(E)$ монокристаллического кремния КМД4ВИЛ p -типа при скользких углах падения 4, 8 и 12°. По сравнению с нашей предыдущей работой [3] исследованный интервал энергий E квантов (90—200 эВ) был расширен до 70—400 эВ за счет дополнительных измерений коэффициента отражения на характеристических рентгеновских линиях $AlL_{2,3}$ (72.4 эВ), MoM_{ζ} (192.6 эВ), SK_{α} (277 эВ) и NK_{α} (392.4 эВ) [4].

Результаты измерений на характеристических линиях показаны кружочками, интерполяция между ними дана штриховой линией. Исследованная с помощью непрерывного тормозного излучения тонкая структура спектра отражения в районе $L_{2,3}$ -края поглощения ($E \sim 100$ эВ) показана сплошной линией. Обозначения деталей тонкой структуры на этом и последующих рисунках даны в соответствии с предыдущей работой [3].

Процесс получения оптических постоянных твердого тела из экспериментального спектра отражения обычно включает в себя два после-

довательных этапа [1, 5, 6]: расчет с помощью дисперсионного соотношения Крамерса—Кронига фазового сдвига волны, возникающего при ее отражении от поверхности твердого тела, и затем непосредственное вычисление оптических постоянных, используя уравнения Френеля.

Будем считать рентгеновское излучение на выходе монохроматора РСМ-500 неполяризованным, поскольку скользкие углы падения излучения на фильтрующее зеркало и дифракционную решетку невелики ($< 10^\circ$) и можно полагать, коэффициенты отражения для излучения разных типов поляризации мало отличающимися величинами [2, 7, 8]. Учитывая это, для количественного описания отражения неполяризованного излучения от поверхности твердого тела при малых скользких углах падения ϑ можно использовать формулу Френеля для s-поляризованного излучения (электрический вектор E перпендикулярен плоскости падения). Если комплексный показатель преломления $\tilde{n} = n - ik$ (n и k — вещественные положительные показатели преломления и поглощения), то

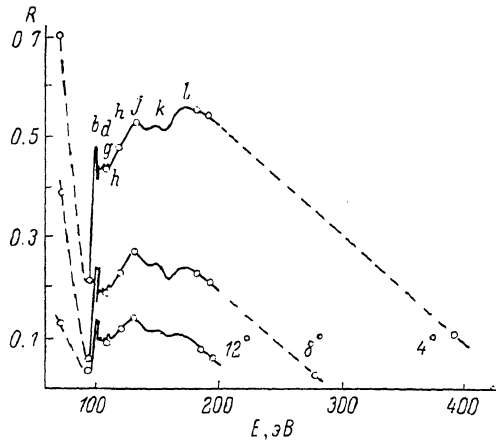


Рис. 1. Спектральная зависимость коэффициента отражения R монокристаллического кремния в области энергий квантов 70—400 эВ.

Кружочками показаны результаты измерений на характеристических рентгеновских линиях (штрихами дана интерполяция между ними), сплошной линией — на непрерывном тормозном излучении.

используемая формула Френеля для комплексного коэффициента отражения $\tilde{r}$ представляется в виде

$$\tilde{r} = \frac{a - ib - \sin \vartheta}{a - ib + \sin \vartheta}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} a^2 - b^2 &= n^2 - k^2 - \cos \vartheta, \\ ab &= nk. \end{aligned} \quad (2)$$

С другой стороны, комплексный коэффициент отражения $\tilde{r}$, связывающий амплитуды падающей и отраженной волн, можно выразить через его модуль $|\tilde{r}| = \sqrt{R}$ (R — коэффициент отражения для интенсивности) и фазовый сдвиг ψ волны, возникающий при ее отражении от поверхности твердого тела,

$$\tilde{r} = \sqrt{R} e^{i\psi}. \quad (3)$$

Решая совместно уравнения (1) и (3), можно выразить величины a и b через экспериментальные характеристики R и ϑ

$$\left. \begin{aligned} a &= \frac{(1 - R) \sin \vartheta}{1 + R - 2\sqrt{R} \cos \psi}, \\ b &= \frac{-2\sqrt{R} \sin \vartheta \sin \psi}{1 + R - 2\sqrt{R} \cos \psi}. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Для определения из (4) и (2) оптических констант n и k необходимо знать фазовый сдвиг ψ , который можно определить, используя интегральное соотношение Крамерса—Кронига [7, 9]

$$\psi(E_0) = \frac{E_0}{\pi} VP \int_0^\infty \frac{\ln R(E)}{E^2 - E_0^2} dE, \quad (5)$$

где E — энергия квантов и VP означает, что интеграл берется в смысле главного значения. Величина ψ зависит от частоты излучения, соотношения между показателями преломления и поглощения и лежит в интервале от $-\pi$ до 0 [1, 5].

Так как измерение спектральной зависимости $R(E)$ при определенном угле ϑ удастся выполнить лишь в ограниченном интервале энергий (E_1 , E_2), то вычисление фазового сдвига ψ с помощью (5) является достаточно сложной процедурой, требующей физически оправданных экстраполяций для $R(E)$ вне экспериментального интервала энергий квантов.

Если, интегрируя по частям, преобразовать интеграл (5) к виду [7, 9]

$$\psi(E_0) = \frac{1}{2\pi} VP \int_0^\infty \ln \left| \frac{E + E_0}{E - E_0} \right| \frac{d[\ln R(E)]}{dE} dE, \quad (6)$$

то становится очевидным, что основные вклады в величину ψ дают спектральные области, либо соседние с E_0 (функция $\ln \left| \frac{E + E_0}{E - E_0} \right|$ имеет здесь сильный пик), либо те, в которых функция $R(E)$ быстро изменяется (это приводит к большой величине производной $d \ln R/dE$). Применительно к ультрамягким рентгеновским спектрам отражения это означает, что вид экстраполяции экспериментального спектра отражения в ультрафиолетовую ($E < E_1$) и более жесткую рентгеновскую ($E > E_2$) области спектра может оказывать значительное влияние на величину фазы ψ , так как в ультрафиолетовой области спектра обычно наблюдаются сильные колебания R , связанные с межзонными переходами, а для жесткой рентгеновской области спектра характерно резкое убывание коэффициента отражения.

Высокоэнергетическая экстраполяция ультрафиолетового спектра отражения ($E > E_2$) проводится обычно по степенному закону

$$R(E) = R(E_2) \left(\frac{E_2}{E} \right)^m, \quad (7)$$

и на основании результатов применения для описания отражения модели свободных электронов выбирается $m=4$ [5, 6]. Однако, как показали исследования спектрального хода линейного коэффициента поглощения

$\mu = \frac{4\pi E}{hc} k$ в области ультрамягкого рентгеновского излучения [10], приближение свободных электронов, приводящее к зависимости $\mu \sim E^{-3}$, еще не дает адекватного описания экспериментальных кривых $\mu(E)$, убывающих в этой части спектра значительно медленнее. В связи с этим нами была проанализирована возможность выбора m в интервале от 2 до 4. На основе анализа в области $E=98-105$ эВ тонкой структуры в L_2 , z -спектре поглощения кремния, рассчитанной из спектра отражения для $\vartheta=4^\circ$ при разных m , и сравнения полученных кривых со спектром прямого фотопоглощения кремния [11] было выбрано $m=2.5$ для $E > 400$ эВ.

В области малых энергий экспериментальная кривая линейно продолжалась до $R=1$ при $E=0$ [7]. Все расчеты были проведены на ЭВМ ЕС-1022. Используя описанную выше методику расчета, из спектральных зависимостей коэффициента отражения R (рис. 1) были получены энергетические зависимости линейного коэффициента поглощения μ и показателя преломления n для монокристаллического кремния (рис. 2—4).

На рис. 2 и 3 хорошо видно, что общий вид рассчитанных спектральных зависимостей μ и n в области энергий квантов 90—190 эВ как по числу деталей структуры, так и по их энергетическому положению слабо зависит от того, какой из спектров отражения (4, 8 или 12°) был использован в расчете. Следует, правда, отметить отчетливое увеличение рассчитанных коэффициентов поглощения μ при возрастании скользящего угла падения ϑ от 4 до 12° . Небольшие величины статистической ошибки ($\sim 2\%$) при измерении интенсивности падающего и отраженного пучков и

ошибки в определении угла (2—5%) не позволяют связать этот эффект с экспериментальной точностью при измерении спектра отражения. Одной из возможных причин такого роста μ может быть увеличение глубины проникновения излучения с ростом угла, что сопровождается воз-

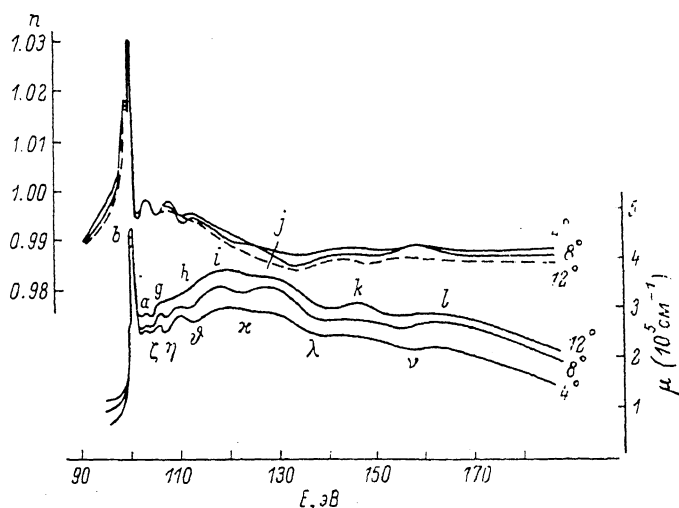


Рис. 2. Спектральные зависимости показателя преломления n и линейного коэффициента поглощения μ монокристаллического кремния, рассчитанные из спектров отражения R при скользящих углах падения 4, 8 и 12°.

растанием средней плотности вещества в отражающем приповерхностном слое твердого тела [3].

Необходимо также обратить внимание на постепенное уменьшение с ростом θ и практически полное исчезновение при 12° в спектре μ струк-

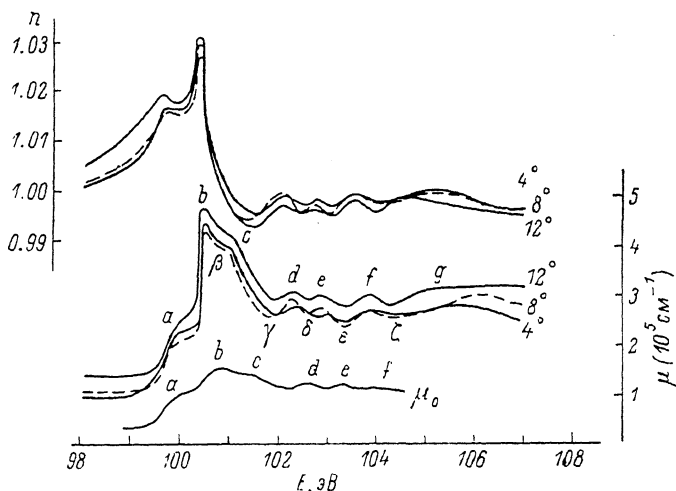


Рис. 3. Ближняя тонкая структура в спектрах n и μ монокристаллического кремния в районе L_2 -з-края поглощения.

μ_0 — спектр, полученный методом прямого фотопоглощения [11].

туры (ζ , η , θ , κ), которая на основе сравнений со структурой SiL_2 -спектров поглощения и отражения SiO_2 [12, 13] связывается с наличием пленки SiO_2 на поверхности исследованного монокристаллического кремния. Однако, как видно из рис. 2, наличие тонкого слоя оксида на поверхности кремния не приводит к сильным изменениям в спектральных зависимостях оптических постоянных.

Сравнивая спектральное поведение μ и n в области энергий квантов 90—190 эВ, видим, что коэффициент преломления испытывает значительно более слабые относительные изменения, чем коэффициент поглощения. Единственный сильный пик в спектре n наблюдается только в районе $L_{2,3}$ -края поглощения кремния ($E \sim 100$ эВ), причем в узком интервале энергий 98—101 эВ вблизи края коэффициент преломления заметно превышает 1, достигая величины 1.03 при энергии квантов 100.5 эВ. Это явление, связанное, по-видимому, с аномальной дисперсией n в области края поглощения [14], ранее наблюдалось также для соседних с кремнием элементов Mg и Al [15]: спектры n , рассчитанные из спектров фотопоглощения, вблизи $L_{2,3}$ -краев имели спектральные участки с $n > 1$.

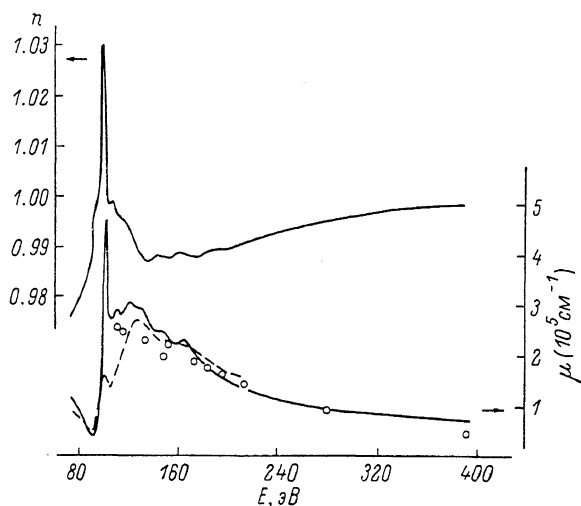


Рис. 4. Оптические постоянные монокристаллического кремния в области энергий квантов 70—400 эВ.

Штриховая линия — $\mu(E)$, по данным [17]; светлые кружки — табличные данные [18].

Для спектров μ и n , рассчитанных из ультрамягких рентгеновских спектров отражения кремния, можно отметить также наличие корреляции между деталями тонкой структуры, характерных для спектров оптических постоянных в ультрафиолетовой области спектра [1, 16], а именно, пики и спады в коэффициенте преломления соответствуют краям и пикам поглощения.

Интересно сравнить тонкую структуру рассчитанного спектра поглощения и спектра, полученного прямым измерением фотопоглощения. Из-за отсутствия возможности изготовить из монокристаллического кремния бездефектную мембрану толщиной ~ 0.1 мкм мы не смогли провести измерение спектра поглощения Si параллельно с измерением спектра отражения. Поэтому для проведения интересующего нас сравнения мы воспользовались данными работы [11], в которой в узком спектральном интервале 99—105 эВ была исследована ближняя тонкая структура $L_{2,3}$ -спектра поглощения монокристаллического кремния.

Сравнивая рассчитанный и экспериментальный спектры (рис. 3), прежде всего следует обратить внимание на идентичность тонкой структуры и хорошее совпадение энергетических положений ее деталей в обоих спектрах. Необходимо, однако, отметить существенные различия в интенсивностях деталей структуры в сравниваемых спектрах. Так, в рассчитанном спектре полосы α — f примерно в 3 раза более интенсивнее, чем в экспериментальном. Наличие такого сильного расхождения отчасти может быть обусловлено неточностью экстраполяции R вне экспериментального интервала спектра (70—400 эВ) и грубостью сделанного нами

при расчете допущения о неполяризованности рентгеновского излучения, отражающегося от исследуемого объекта.

На рис. 4 приведены спектры μ и n , рассчитанные из спектра отражения при $\theta=4^\circ$ в области энергий квантов 70—400 эВ. Здесь же для сравнения представлены результаты прямых измерений коэффициентов поглощения монокристаллического кремния в широком спектральном интервале, выполненные с использованием непрерывного синхротронного излучения [17] (пунктирная кривая) и отдельных рентгеновских характеристических линий [18] (кружочки). Видно, что величины μ в рассчитанном спектре хорошо согласуются с результатами прямых измерений [17, 18] практически во всем спектральном интервале 70—400 эВ за исключением лишь области ближней тонкой структуры ($E=100$ —120 эВ). Причины такого несоответствия в сравниваемых спектрах окончательно не ясны. Однако, так как расхождения наблюдаются в области резких изменений μ , то можно предполагать, что, кроме указанной выше приближенности расчета, наблюдаемый эффект может быть обусловлен в определенной степени возможной неоднородностью по толщине мембраны из монокристаллического кремния, которая использовалась в экспериментах по фотопоглощению [11, 17]. Известно [10], что неоднородность образца по толщине приводит к заметному занижению μ , особенно в области тонкой структуры.

В заключение отметим еще один интересный экспериментальный факт: спектральный ход коэффициента отражения R монокристаллического кремния в районе $L_{2,3}$ -края поглощения практически не отличается от спектрального поведения μ (рис. 2 [3] и рис. 3), что весьма необычно для области ультрамягкого рентгеновского излучения, для которой характерен «переворот» тонкой структуры спектров отражения по отношению к структуре спектров поглощения [2, 10], т. е. совпадение энергетических положений максимумов в спектре R с минимумами в спектре μ и наоборот.

Л и т е р а т у р а

- [1] Т. Мосс, Г. Баррел, Б. Эллис. Полупроводниковая оптоэлектроника. Мир, М., 1976.
- [2] О. А. Ершов. Автореф. канд. дис. ЛГУ, Л., 1966.
- [3] А. С. Виноградов, Е. О. Филатова, Т. М. Зимкина, ФТТ, 24, 1718, 1982.
- [4] J. A. Bearden. Rev. Mod. Phys., 39, 78, 1967.
- [5] F. Stern. Sol. St. Phys. vol. 15. Academic Press, London, 1963.
- [6] В. В. Соболев, С. А. Алексеева, В. И. Донецких. Расчеты оптических функций полупроводников по соотношениям Крамерса—Кронига. Кишинев, Штиница, 1976.
- [7] О. А. Ершов, С. И. Чернова. Опт. и спектр., 26, 597, 1969.
- [8] B. L. Henke. Phys. Rev. A, 6, 94, 1972.
- [9] D. M. Roessler. Brit. J. Appl. Phys., 16, 1359, 1965.
- [10] Т. М. Зимкина, В. А. Фомичев. Ультрамягкая рентгеновская спектроскопия. Л., Изд. ЛГУ, 1971.
- [11] F. O. Brown, O. Rustgi. Phys. Rev. Lett., 28, 497, 1972.
- [12] О. А. Ершов, А. П. Лукирский. ФТТ, 8, 2137, 1966.
- [13] Е. О. Филатова, А. С. Виноградов. Тез. докл. VI Всесоюзной конференции по физике ВУФ излучения и взаимодействию излучения с веществом. с. 157, М., 1982.
- [14] М. А. Блохин. Физика рентгеновских лучей, гл. 5. М., ГИИТЛ, 1957.
- [15] H. J. Nageman, W. Gudat, C. Kunz. JOSA, 65, 742, 1975.
- [16] Я. Тауд. Оптические свойства полупроводников в видимой и ультрафиолетовой областях спектра. М., Мир, 1967.
- [17] F. C. Brown, R. Z. Bachrach, M. Skibowski. Phys. Rev. B, 15, 4781, 1977.
- [18] B. L. Henke, E. S. Ebsen. Adv. in X-ray Analysis, 17, 150, 1974.
- [19] Л. К. Израйлева, И. Б. Боровский. Изв. АН СССР, сер. физ., 36, 438, 1972.