

Моделирование оптических свойств многослойных структур, содержащих слои пористого кремния и оптические покрытия

Н.В. Латухина¹, Д.А. Лизункова¹, И.А. Шишкин¹

¹Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. Моделируются оптические процессы отражения и пропускания в многослойной структуре, содержащей слои пористого кремния и оптические покрытия. Показано, что использование пористого кремния и пленок фторида диспрозия и сульфида цинка может значительно улучшить основные оптические характеристики светочувствительной структуры.

1. Введение

Многослойные структуры на основе пористого кремния и покрытиями могут быть основой эффективных фотопреобразователей (ФЭП) на кремниевой подложке.

В работах [1-3] было показано, что для повышения стабильности пористого слоя и уменьшения его электрического сопротивления необходимо создавать пористый слой локально на поверхности с затравками порообразования, а также использовать стабилизирующее покрытие, в качестве которых могут выступать как карбид кремния, так и фториды РЗЭ. Исследование и моделирование физических процессов, проходящих при поглощении света в сложных структурах, содержащих наноразмерные объекты, дает основание для определения оптимальной фоточувствительной структуры. Так в работе [4] моделируется поглощение и отражение света в тонкопленочной многослойной структуре на стеклянной подложке, содержащей слои гидрогенизированного аморфного кремния. В работе [5] моделируется отражения света в многослойной структуре с пористым слоем в качестве антиотражающего покрытия. В настоящей работе проводится моделирование процессов отражения и пропускания в структурах, содержащих слои нанокристаллического пористого кремния на монокристаллической подложке и оптические покрытия.

В основе действия просветляющих покрытий лежит явление интерференции световых волн. Конструкция покрытия, то есть его толщина и показатели преломления слоев покрытия, подбирается таким образом, чтобы световые волны, отражающиеся от обеих его поверхностей, имели разность хода в половину длины волны; кроме того, эти волны должны быть одинаковыми по амплитуде и длине. В таком случае отраженные волны интерферируют и гасят друг друга. Правильно подобранное просветляющее покрытие резко уменьшает отражение и увеличивает светопропускание.

Простейшим примером антибликового покрытия является четвертьволновой слой. Одним из больших недостатков такого однослойного покрытия является то, что, как правило, нет

практического материала с необходимым показателем преломления для достижения низкой отражательной способности. Переход к многослойным покрытиям позволяет уменьшить коэффициент отражения для большего диапазона длин волн. Сочетание из нескольких слоев можно использовать для уменьшения коэффициента отражения над гораздо более широким рядом длин волн, чем однослойный пока позволяющий более широкому разнообразию реальных материалов быть использованным.

Моделирование отражающих свойств многослойной структуры позволяет выявить оптимальные параметры слоев, приводящие к снижению коэффициента отражения во всем исследуемом спектральном диапазоне.

Моделирование многослойной структуры было проведено в пакете COMSOL Multiphysics.

2. Моделирование

Рассмотрим френелевское отражение плоской монохроматической волны от многослойной структуры (рис. 1).

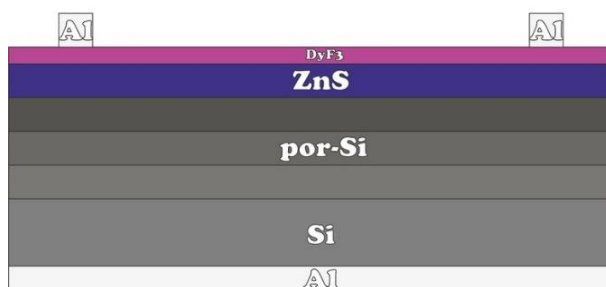


Рисунок 1. Схематичное изображение исследуемой структуры.

Если решение волнового уравнения для плоской монохроматической волны, распространяющейся в направлении z , записать в виде

$$E = E_0 \exp[i\omega \left(t - \frac{\tilde{n}z}{c} \right)], \quad (1)$$

то комплексный показатель преломления определяется выражением

$$\tilde{n} = n' - in'' \quad (2)$$

Коэффициент поглощения волны для амплитуды тогда равен

$$k = \frac{2\pi n''}{\lambda} \quad (3)$$

а для интенсивности

$$K = \frac{4\pi n''}{\lambda} \quad (4)$$

где ω – частота, а λ – длина волны излучения в вакууме. Для волны, падающей под углом θ_0 на поверхность, разделяющую две среды с показателями преломления n_0 и n_1 френелевские амплитудные коэффициенты отражения r и пропускания t имеют вид

$$r_{\parallel} = \frac{\tilde{n}_0 \cos \theta_0 - \tilde{n}_1 \cos \theta_1}{\tilde{n}_0 \cos \theta_0 + \tilde{n}_1 \cos \theta_1} \quad (5)$$

$$r_{\perp} = \frac{\tilde{n}_1 \cos \theta_0 - \tilde{n}_0 \cos \theta_1}{\tilde{n}_1 \cos \theta_0 + \tilde{n}_0 \cos \theta_1} \quad (6)$$

$$t_{\parallel} = \frac{2\tilde{n}_0 \cos \theta_0}{\tilde{n}_0 \cos \theta_0 + \tilde{n}_1 \cos \theta_1} \quad (7)$$

$$t_{\perp} = \frac{2\tilde{n}_0 \cos \theta_0}{\tilde{n}_1 \cos \theta_0 + \tilde{n}_0 \cos \theta_1} \quad (8)$$

При решении этих уравнений совместно с законами преломления

$$\frac{\sin \theta_0}{\sin \theta_1} = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_0} \quad (9)$$

стоит учитывать, что для поглощающих сред угол преломления также в общем случае комплексный. При отражении от такой среды амплитудные коэффициенты в виде

$$r_{\parallel} = |r_{\parallel}| e^{i\varphi_{\parallel}} \quad (10)$$

$$r_{\perp} = |r_{\perp}|e^{i\varphi_{\perp}} \quad (11)$$

где φ_{\parallel} , φ_{\perp} - изменение фазы при отражении. Коэффициент поглощения по интенсивности при этом равен

$$R_{\parallel,\perp} = r_{\parallel,\perp} r_{\parallel,\perp}^* \quad (12)$$

Коэффициент пропускания в отсутствие потерь на поверхности

$$T = \frac{\tilde{n}_0 \cos \theta_1}{\tilde{n}_0 \cos \theta_0} |t|^2 \quad (13)$$

3. Результаты

В данной модели рассматривался частично-поляризованный свет, падающий по нормали к поверхности.

Расчеты были проведены для структуры пористого кремния, рассматривая ее в виде нескольких тонких слоев. Пористый слой кремния представляет собой в основном некоторую аперриодическую структуру, состоящую из большого количества потенциальных ям с различной глубиной, разделенных барьерами от диоксида кремния. Последние являются проницаемыми для излучения и носителями заряда, генерируемых там под действием света или инжектированных в зерно. Поскольку нанокристаллы могут быть представлены в виде квантованных точек, то спектр энергетических состояний квантуется. В некоторых случаях размеры нанокристаллов различны и уменьшаются при удалении от монокристаллической подложки. Тогда пористая структура кремния может быть представлена в виде градуированной запрещенной зоны. Наиболее эффективный выброс в такой структуре может быть реализован в условиях двойной инжекции.

Модель предполагает образование в слоях пористого кремния нанокристаллов и пор различных размеров. Предполагается, что меньшие нанокристаллы располагаются вблизи поверхности и их концентрация уменьшается с глубиной. Это вызывает градиент пористости, что в свою очередь, приводит к градиентам макроскопической диэлектрической функции и показателя преломления. Поэтому пористый кремний можно рассматривать как полупроводник с изменяющейся запрещенной зоной (градиентные полупроводниковые щели) или, в соответствии с нашим случаем, в виде нескольких слоев с разными показателями преломления, увеличивающийся к внутренней поверхности раздела с кремниевой подложкой [5].

Коэффициент пропускания от многослойной структуры, которая содержала слои пористого кремния, сульфида цинка и фторида диспрозия, составил порядка 30% для диапазона длин волн от 480 до 650 нм, по сравнению с [6]. Максимальное значение в 68% он принимал при 400 нм и 800 нм. В данной модели бралась структура толщиной 250 мкм, что соответствует реальным кремниевым подложкам. Результаты моделирования приведены на рисунке 2.

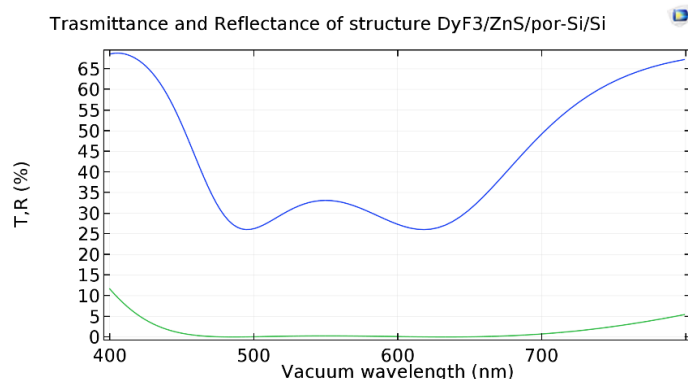


Рисунок 2. Спектральные характеристики коэффициента отражения (зеленая кривая) и пропускания (синяя кривая), полученные в результате моделирования.

Теоретические спектры коэффициента отражения отличаются формой от экспериментально полученного кривого отражения для полированных пластин с двойным покрытием и пористым слоем. На экспериментальных кривых наблюдаются пики в районе 390 нм и 720 нм (Рис.3).

Значение коэффициента отражения колеблется от 5 до 15% во всем спектральном диапазоне. В теории же среднее значение коэффициента отражения примерно 1-2% в диапазоне длин волн от 450 до 750 нм, что вполне согласуется с результатами моделирования, полученного в работе [5]. В целом, различия теории и эксперимента можно объяснить тем, что реальный пористый слой является более неоднородной структурой по своим оптическим свойствам.

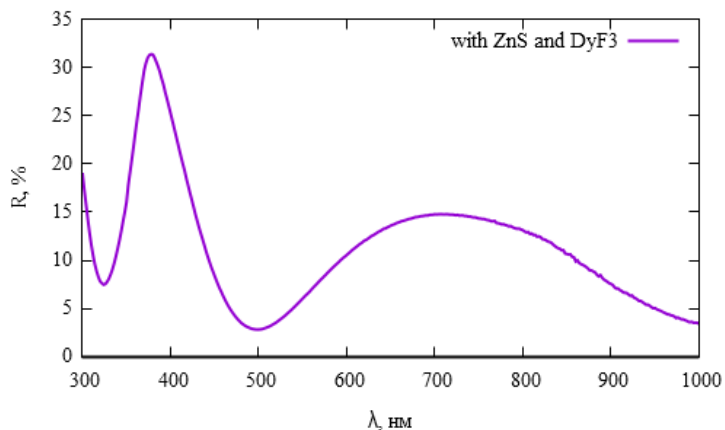


Рисунок 3. Спектральные характеристики коэффициента отражения (эксперимент).

4. Заключение

Таким образом, моделирование френелевского отражения от многослойной структуры, содержащей слои пористого кремния и оптических покрытий, показывает, что предлагаемый в модели учет разницы показателей преломления в пористых слоях, несмотря на частичное совпадение хода кривых, удовлетворительного согласия не дает, поскольку структура имеет более сложный характер.

5. Литература

- [1] Дрондин, А.В. Фотоэлектрические свойства структур на базе пористого кремния с одно- и двухслойными покрытиями / А.В. Дрондин, Н.В. Латухина, Д.А. Лизункова, В.Д. Паранин // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. – 2017. – Т. 20, №4. – С. 50-54.
- [2] Кирсанов, Н.Ю. Многослойные структуры на основе пористого кремния и соединений редкоземельных элементов: исследование спектральных характеристик / Н.Ю. Кирсанов, Н.В. Латухина, Д.А. Лизункова, Г.А. Рогожина, М.В. Степихова // Физика и техника полупроводников. – 2017. – Т. 51, № 3. – С. 367-371.
- [3] Латухина, Н.В. Многослойные наноструктуры на базе пористого кремния для оптоэлектроники / Н.В. Латухина, Д. А. Лизункова, Г. А. Рогожина, И. М. Жильцов, М. В. Степихова, В. И. Чепурнов // Фотоника. – 2018. – № 5. – С. 70-74. DOI: 10.22184/1993-7296.2018.12.5.508.513.
- [4] Nesterenko, D.V. Absorption Enhancement in Thin-Film Solar Cells with Perforated Holes / D.V. Nesterenko, S. Hayashi, S. Aazou, Z. Laghfour, A. Ulyashin, A. Slaoui, A. Dinia, M. Abd-Lefdil, Z. Sekkat // Plasmonics. – 2018. – Vol 13(3). – P. 939-945.
- [5] Aroutiounian, V.M. Calculations of the reflectance of porous silicon and other antireflection coating to silicon solar cells / V.M. Aroutiounian, K.R. Maroutyan, A.L. Zatikyan, K.J. Touryan // Thin Solid Films. – 2002. – Vol. 403-404. – P. 517-521.
- [6] Сагун, Е.А. Разработка пористых структур на кремнии / Е.А. Сагун, А.В. Полюшкевич, П.А. Харлашин, О.В. Семенова, А.Я. Корец // Журнал Сибирского федерального университета. Машиностроение и технологии. – 2010. Т. 4, № 3. – С. 430-443.

Simulation of the Optical Properties of Multilayer Structures Containing Layers of Porous Silicon and Optical Coatings

N.V. Latukhina¹, D.A. Lizunkova¹, I.A. Shishkin¹

¹Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. Optical processes of reflection and transmission in a multilayer structure containing layers of porous silicon and optical coatings are modelled. It is shown that the use of porous silicon and films of dysprosium fluoride and zinc sulphide can significantly improve the basic optical characteristics of the photosensitive structure