

Исследование наведенного одноосной деформацией линейного дихроизма в кристаллах кремния

© Е.Ф. Венгер, И.Е. Матяш, Б.К. Сердега[†]

Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины,
03028 Киев, Украина

(Получена 8 января 2003 г. Принята к печати 21 января 2003 г.)

Методом поляризационной модуляции измерены спектральные характеристики линейного дихроизма в одноосно-деформированных образцах кремния в диапазоне краевого поглощения. Обнаружена тонкая структура спектров, связанная с участием акустических и оптических фононов в межзонных переходах под действием линейно поляризованного излучения. Из совокупности характеристик пропускания и дихроизма вычислена спектральная характеристика изменения коэффициента поглощения, содержащая фононные особенности. Проведен феноменологический анализ процесса поляризационной модуляции, из которого следует, что спектральная характеристика величины дихроизма является производной функции пропускания по коэффициенту поглощения.

1. Кристаллы кремния, относящиеся к кубической системе, могут быть анизотропными и вследствие этого проявлять эффект линейного дихроизма только в результате какого-либо направленного воздействия. Одним из таких воздействий, понижающим симметрию всего кристалла, является одноосная деформация.

Уместно отметить, что в реальных кристаллах в результате неоднородного градиента потенциала, связанного либо с температурой, либо с концентрацией легирующей примеси, практически всегда присутствуют упругие внутренние деформации, определяемые направлением и величиной градиента потенциала [1]. Поэтому использование эффекта линейного дихроизма, т.е. регистрация разностей спектральных зависимостей коэффициентов поглощения для линейно поляризованного излучения, в котором электрическая компонента ориентирована параллельно и перпендикулярно по отношению к направлению деформации, могло бы стать методом измерения и исследования в этих кристаллах величины анизотропии диэлектрических свойств, создаваемых этими деформациями.

Что же касается кристаллов кремния, то в литературе отсутствуют сведения об этих исследованиях. Между тем признаки дихроизма наблюдались при исследовании в кремнии электроотражения [2], что проявилось в различии спектральных характеристик, измеренных при двух ортогональных поляризациях излучения. Однако в этой работе, как и в [3], приведены исследования в спектральном диапазоне прямых переходов, которые в кремнии находятся вдали от края фундаментального поглощения. Учитывая, что в силу особенностей зонного энергетического спектра кремния межзонные переходы в нем являются непрямыми в широком диапазоне поглощения, можно ожидать проявления фононов в спектральной характеристике дихроизма. В самом деле, в параметрах прошедшего сквозь образец излучения должна содержаться информация о механизмах его взаимодействия с образцом. Поэтому от того, насколько является

совершенным анализ этих параметров в используемом методе исследования, зависит его обнаружительная способность по отношению к тому или иному свойству материала.

Это замечание приобретает особое значение при исследовании наведенного дихроизма в кремнии, в котором вследствие больших значений константы деформационного потенциала наблюдение эффекта и его регистрация традиционным способом являются проблематичными. В то же время поляризационная модуляция, как один из методов дифференциальной спектроскопии, обладающая до последнего времени мало изученной, обладает рядом достоинств, присущих модуляционным методикам. Поэтому испытание метода, успешно применявшегося ранее для исследования родственных поляризационных эффектов — фото- и термофотоупругости [4], представляет не только методический интерес.

Основанием для оптимизма является тот факт, что, как показано в работах [5,6], в спектрах электропоглощения в кремнии наблюдаются в диапазоне малых значений коэффициента поглощения осцилляции и немонотонности, связанные с участием фононов в не прямых межзонных оптических переходах. Кроме того, признаки дихроизма проявляются и в фотоэлектрических эффектах, наблюдаемых в одноосно-деформируемых кубических кристаллах. Для примера укажем на работу по обнаружению поляризационной зависимости экситонного излучения в области не прямых переходов в Si [7] и собственной фотопроводимости в узкозонных полупроводниках [8].

2. Основным свойством материала, выбираемого для исследований, должно быть преимущественно фононное рассеяние носителей тока. Поэтому в качестве исследуемого объекта использованы образцы, вырезанные из слитка слабо легированного *p*-Si с удельным сопротивлением 200 Ом·см. Образцы имели форму прямоугольных пластин с размерами освещаемой поверхности 10×5 мм², а толщина имела значения 3, 2, 1, 0,5 мм. Кристаллографические ориентации образцов были таковы, что направление одноосного усилия их сжатия совпадало с одним из трех основных кристаллографических

[†] E-mail: serdega@isp.kiev.ua

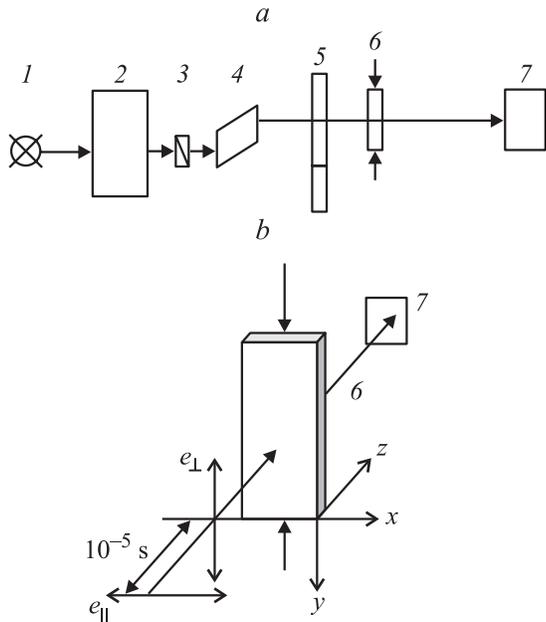


Рис. 1. Блок-схема оптической установки (а) и схема опыта (б): 1 — источник света (галогеновая лампа), 2 — монохроматор, 3 — поляризатор, 4 — ромб Френеля, 5 — фотоупругий модулятор поляризации, 6 — образец в устройстве для сжатия, 7 — фотодетектор.

направлений — [100], [110] и [111]. Обработка поверхностей образцов обеспечивала постоянство оптической длины хода для всех лучей и минимальное их рассеяние. Сжатие образцов производилось в устройстве, которое отличалось от типичных для таких исследований приспособлений только тем, что в нем с помощью полупроводникового датчика силы на основе эффекта поперечной тензоэдс измерялась величина механического напряжения.

Источником света с изменяющейся длиной волны служил дифракционный монохроматор МДР-12, на входе которого устанавливалась галогенная лампа КГМ-150. Такая система позволяла обеспечивать в используемом диапазоне длин волн постоянный поток фотонов на уровне $10^{15} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$. Особенностью оптической схемы установки, изображенной на рис. 1, а, является использование в ней модулятора поляризации. Этот элемент схемы представляет собой динамическую фазовую пластинку [9], функционирование которой основано на фотоупругом эффекте. В качестве ее используется пластинка из плавленого кварца — изотропного вещества, анизотропия диэлектрических свойств в котором создавалась знакопеременной деформацией сжатия–растяжения. Это достигалось тем, что пластинка возбуждалась на частоте собственных колебаний звуковой стоячей волной от резонатора из кристаллического кварца, находящегося под действием переменного электрического напряжения. При определенных его значениях фазовая пластинка на протяжении периода колебаний дважды становится четвертьволновой, и тогда циркулярная поляризация входного излучения преобразуется в линейную на выходе,

причем азимуты электрических компонент периодически с частотой 50 кГц изменяются на 90° (рис. 1, б). Таким образом, при неизменной интенсивности падающего на образец излучения на детекторе (германиевый фотодиод) появлялся сигнал, пропорциональный разности коэффициентов пропускания для линейных поляризаций, параллельных осям оптической индикатрисы образца. Сигнал усиливался селективным нановольтметром и регистрировался аналоговым графопостроителем.

Отметим одну особенность модулятора, которая заключается в возможности его вращения относительно оптической оси. Поскольку состояния поляризации излучения, выходящего из модулятора, являются определенным образом связанными с его азимутальным положением, то его вращением можно устанавливать заданные состояния поляризации относительно осей образца. При этом становится возможной идентификация исследуемого эффекта по признаку параллельности электрических компонент волны осям образца. Тем самым становится возможным контролировать в измеряемом сигнале отсутствие паразитных составляющих, связанных, например, с проявлением френелевских условий неортогонального падения света на образец или с несовершенством оптических элементов.

Измерялись разности спектральных характеристик пропускания для линейно поляризованного излучения, когда электрические компоненты волны параллельны оптическим осям образца (дифференциальные характеристики), в зависимости от энергии квантов излучения, от толщины образцов в направлении распространения излучения и от величины деформации образцов. Все измерения проводились при комнатной температуре.

3. Напомним, что при одноосной деформации образцов кремния вдоль кристаллографического направления [111] происходит расщепление вырожденных в центре зоны Бриллюэна уровней энергии валентной зоны, а вдоль направлений [110] и [100] — уровней энергии зоны проводимости. Снятие вырождения при сжатии сопровождается изменением ширины запрещенной зоны [10] и, следовательно, изменением, в сторону увеличения, коэффициента поглощения в случае неполяризованного излучения [11].

При использовании поляризованного излучения ситуация усложняется. Поскольку энергетические состояния в валентной зоне перемешиваются (в частности, зоны V_+ и V_- меняются местами в направлениях, перпендикулярных направлению деформации), изменяются правила отбора для межзонных переходов, возбуждаемых поляризованным излучением [12]. Так, для переходов из зоны V_+ разрешенными являются переходы, возбуждаемые обоими состояниями поляризации. Что же касается зоны V_- , то переходы из нее являются разрешенными только для поляризаций, перпендикулярных направлению сжатия. В этом состоит природа линейного дихроизма, т.е. причина появления разности в значениях коэффициентов поглощения в одноосно-деформированных кубических прямозонных кристаллах.

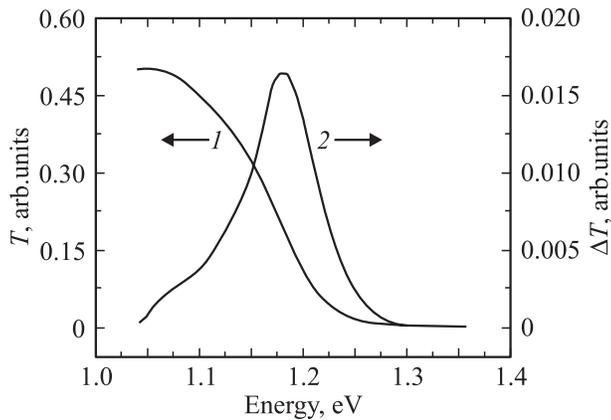


Рис. 2. Зависимости пропускания (1) и его изменения, вызванного деформацией (2), от энергии квантов падающего излучения для образца толщиной 0.38 мм, деформированного в направлении [110] усилием в 3 кбар.

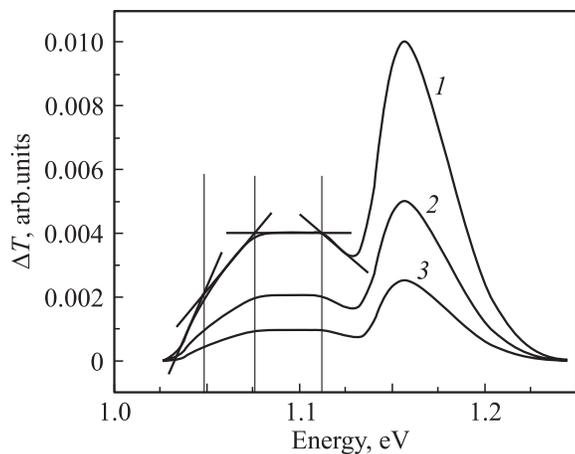


Рис. 3. Зависимости изменения пропускания от энергии квантов падающего поляризованно-модулированного излучения при различных величинах одноосного механического напряжения σ , кбар: 1 — 4, 2 — 2, 3 — 1. Толщина образца 0.5 мм, ориентация [100].

В кристаллах кремния ситуация усложняется за счет многодолинного энергетического спектра зоны проводимости, что является причиной не прямых переходов, а также ориентационной зависимости их вероятностей в случае одноосной деформации. Именно эти два обстоятельства проявляются, как видно из приведенных рис. 2 и 3, в существенном различии дифференциальных характеристик пропускания образцов кремния, ориентированных вдоль различных кристаллографических осей. Однако общим при всем том является тонкая структура характеристик, проявляющаяся в сложной и немонотонной форме полосы дихроизма в случае ориентации [110] (рис. 2) и даже наличии двух полос в образцах с ориентацией [100] (рис. 3). Обращает на себя внимание также то обстоятельство, что кривая 2 на рис. 2 является в первом приближении производной спектральной

характеристики пропускания (кривая 1 на рис. 2), которая могла бы быть получена λ -модуляцией. Действительно, можно ожидать, что вследствие одноосной деформации характеристика пропускания, единственная для изотропного случая, расщепляется на две. При этом каждая из них относится к определенному состоянию поляризации — параллельному или перпендикулярному оси сжатия. И тогда регистрируемая с помощью поляризационной модуляции максимальная разность амплитуд между ними будет иметь место в области наибольшей крутизны кривой 1. Однако, как следует из рис. 3, где изображено семейство спектральных характеристик дихроизма в образце иной ориентации, это не совсем так. Видно, как сильно отличаются дифференциальные характеристики, хотя их характеристики пропускания практически одинаковы. Заметим при этом, что, как и предполагалось, величина дихроизма оказалась настолько малой при использованных нами значениях механического напряжения, что в приведенном масштабе характеристики коэффициента пропускания для ортогональных поляризаций практически сливаются в одну линию. Поэтому представлениям о различии величин пропускания T и его приращения ΔT свидетельствуют данные, приведенные на осях ординат на рис. 2.

Как на одном рисунке, так и на другом, в спектральных характеристиках дихроизма четко просматриваются протяженные линейные участки, соединенные перегибами. Их аппроксимация до пересечения между собой соседних участков позволяет обнаружить некоторые закономерности в их величине и месте расположения. Так, протяженность первого линейного участка совпадает с точностью до 1 мэВ со значением энергии связи экситона, приведенным в работе [13]. Следующий участок отличается наклоном, но его протяженность равна двум значениям энергии связи экситона. Отметим, что аналогичная интерпретация приводится в трактовке спектров электропоглощения образцов кремния в том же диапазоне энергий, приведенных в работе [6]. Наконец, третий участок прямолинейной характеристики, расположенный между значениями энергий 1.075 и 1.109 эВ, превосходно согласуется с удвоенным значением энергии поперечного акустического (ТА) фонона, приведенным в [14]. Анализ спектральных характеристик на рис. 3 проиллюстрирован обработкой только одной кривой 1. Однако рассмотрение по такой же методике остальных двух кривых показывает, что энергетическое положение точек пересечения линейных участков сохраняется при изменении величины приложенного усилия. Более того, эта же независимость сохраняется и при изменении толщины образцов. В этом случае происходит смещение по шкале энергии характеристики пропускания, изменяется вследствие этого соотношение между экстремумами дифференциальной характеристики для ориентации [100] или их абсолютное значение для ориентаций [110] и [111]. Однако как положение самих экстремумов, так и положение фоннных особенностей остаются фиксированными.

4. Не вызывает сомнения, что обнаруженные особенности дифференциальных спектральных характеристик связаны с теми особенностями энергетического спектра, которые присущи кристаллам кремния. Главная из них заключается в многодолинности зоны проводимости, что приводит прежде всего к пространственной зависимости спектральных характеристик эффекта дихроизма. Для обоснования этой связи проделаем качественное рассмотрение процесса измерения.

Напомним, что измеряемый в данном случае сигнал пропорционален величине $\Delta T = T(\alpha_{\perp}) - T(\alpha_{\parallel})$, т.е. разности функций, зависящих от коэффициентов пропускания α_{\perp} и α_{\parallel} . Если параметр дихроизма $\Delta\alpha < \alpha_{\perp}$, α_{\parallel} , что имеет место в нашем случае, то не трудно получить выражение

$$\Delta T = T(\alpha_{\perp} + \Delta\alpha) - T(\alpha_{\perp}) = (dT/d\alpha)\Delta\alpha,$$

из которого видно, что измеряемая величина есть производная функции пропускания по коэффициенту поглощения, умноженная на величину дихроизма. Разложив производную на две частных $dT/d\alpha = (\partial T/\partial\lambda)(\partial\lambda/\partial\alpha)$, получаем ответ на вопрос об отличии поляризационной модуляции от λ -модуляции в исследовании оптических или фотоэлектрических эффектов. Отсюда следует, чтобы получить из экспериментального результата величину дихроизма, как реакцию кубического кристалла на внешнее воздействие, нужно знать производную пропускания и обратную производную коэффициента поглощения, т.е. дополнительно произвести два измерения. Однако можно пойти по другому пути, на котором требуется только одно дополнительное измерение для получения величины дихроизма, а именно измерение спектральной характеристики пропускания. Тогда из совокупности дифференциальной и интегральной характеристик пропускания, представленных на рис. 2, оказывается возможным получить разность коэффициентов поглощения $\Delta\alpha = \alpha_{\perp} - \alpha_{\parallel}$ для излучений, линейные поляризации которых параллельны осям оптической индикатрисы образца. Для этого преобразованием известного соотношения, связывающего величины коэффициентов пропускания T и поглощения α , можно получить (при условии $\Delta T \ll T$, что имеет место в эксперименте) выражение $\Delta\alpha = B \ln[1 + (\Delta T/T)]$, описывающее спектральную характеристику дихроизма (B — коэффициент, учитывающий толщину образца и отражение).

Семейство этих характеристик, относящихся к образцам трех главных кристаллографических направлений, представлено на рис. 4. Из рисунка видно, что эффект наведенного дихроизма в кристаллах кремния является ориентационно зависящим. Отметим, что такой же особенностью обладают зависимости приращения коэффициента поглощения, полученные в неполяризованном излучении [11]. Однако в отличие от этого случая изменение поглощения в поляризованном излучении имеет для всех трех ориентаций немонотонную зависимость от энергии. Ее интерпретация не вызывает трудностей,

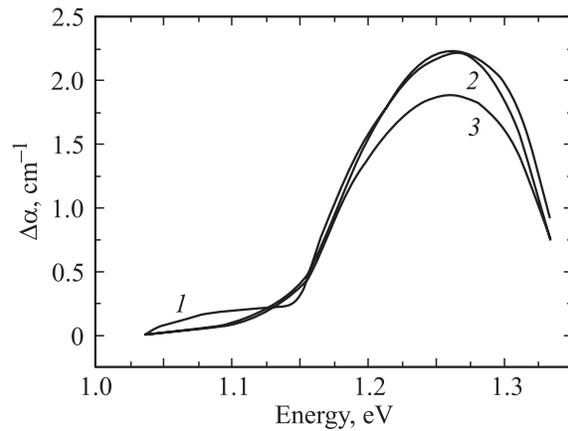


Рис. 4. Зависимости величины дихроизма от энергии квантов излучения для образцов, деформированных одинаковым механическим напряжением вдоль кристаллографических направлений: 1 — [100], 2 — [110], 3 — [111].

если учесть известные факты для кристалла кремния. Так, сильный излом характеристик при $h\nu \approx 1.14$ эВ объясняется тем, что с увеличением энергии квантов света в механизме оптических межзонных переходов поглощение фононов электронами сменяется излучением. Это приводит к возрастанию вероятности переходов при увеличении энергии квантов света больше ширины запрещенной зоны. Кстати, в спектре коэффициента поглощения изотропным образцом излом характеристики при этом же значении энергии наблюдается только в том случае, если она представлена в полуквадратичном масштабе (см. рис. 4 из работы [10]). Что же касается спада величины дихроизма при энергии больше 1.26 эВ, то его можно понять, если учесть, что выше этих значений энергии известная спектральная характеристика коэффициента поглощения в кремнии [15] начинает отклоняться от квадратичной в сторону меньшего наклона. В этом случае различие в значениях ординат между двумя зависимостями, относящимися к ортогональным поляризациям, должно уменьшаться, что и наблюдается в эксперименте. Это значит, что в эффекте линейного дихроизма более ярко проявляются особенности спектральной зависимости коэффициента поглощения, связанные с изменением механизма межзонных переходов.

С учетом изложенных представлений о правилах отбора для излучений с ортогональными поляризациями представляется возможным объяснить происхождение линейных участков, связанных с ТА фононами (рис. 3). Для этого напомним, что в данном случае измерялась разностная характеристика между двумя функциями пропускания. Можно предположить, что при разложении каждой из них коэффициенты при линейных членах оказываются отличающимися, в то время как при более высоких степенях коэффициенты равны. Это вполне реальная ситуация, если привлечь упоминавшуюся модель изменения валентной зоны при одноосной деформации.

Перемешивание состояний для поляризаций, перпендикулярных направлению сжатия, как раз и является основанием для такого предположения.

5. Как и предполагалось, в работе обнаружено, что в спектрах линейного дихроизма, связанного с зона-зонным поглощением света в одноосно-деформированных образцах кремния, проявляются фононы. Причем, как и в случае электропоглощения, здесь наблюдаются акустические фононы. При этом продемонстрирована высокая обнаружительная способность (по отношению к величине анизотропии) метода поляризационно-модуляционной спектроскопии. Кроме того, показано, что зависимость величины дихроизма от энергии является производной функции пропускания по коэффициенту поглощения. В связи с этим представляется возможным использование поляризационной модуляции для исследования энергетического спектра не только на краю поглощения, но и практически во всем диапазоне энергий запрещенной зоны и пространства квазиимпульсов. Для этого, варьируя толщину образцов, а следовательно, и условие полупрозрачности, можно будет проводить измерения и в диапазоне больших коэффициентов поглощения. Учитывая, что поляризационно-модуляционная спектроскопия, как показано в данной работе, является весьма информативной по отношению к немонотонностям или другим особенностям спектральных характеристик коэффициента поглощения, можно надеяться на применение метода в обнаружении и исследовании особенностей зонного спектра типа сингулярностей Ван-Хова.

И наконец, нельзя не отметить возможность использования эффекта индуцированного линейного дихроизма для диагностики внутренних механических напряжений в кристаллах. Как показывает опыт, использованные в работе физические условия и стандартные измерительные устройства позволяют достичь минимального значения достоверно регистрируемой механической деформации на уровне 1 кг/см^2 . При этом имеется в виду, что это значение получено для дифференциальной характеристики пропускания и относится к максимуму ее спектральной зависимости.

Список литературы

- [1] В.Т. Гринченко, Е.В. Никитенко, Б.К. Сердега. Докл. НАН Украины, № 1, 83 (1998).
- [2] G.W. Gobel, E.O. Kane. Phys. Rev. Lett., **15** (4), 142 (1965).
- [3] E.H. Pollak, M. Kardona. Phys. Rev., **172** (3), 816 (1968).
- [4] В.К. Сердега, Ye.F. Venger, Ye.V. Nikitenko. Semicond. Phys., Quant. Electron. Opt., **2** (1), 153 (1999).
- [5] A. Frova, P. Handler. Phys. Rev. Lett., **14** (6), 178 (1965).
- [6] A. Frova, P. Handler, F.A. Germano, D.E. Aspnes. Phys. Rev., **145** (2), 575 (1966).
- [7] L.D. Laude, F.H. Pollak, M. Kardona. Phys. Rev., **3** (8), 2623 (1971).
- [8] Ф.Т. Васько, С.Г. Гасан-заде, М.В. Стриха, Г.А. Шепельский. ФТП, **29** (4), 708 (1995).
- [9] S.N. Jaspersen, S.E. Sahnatterly. Rev. Sci. Instrum., **40** (6), 761 (1969).
- [10] G.G. Macferlane, T.P. McLean, J.E. Quarrington, V. Roberts. Phys. Rev., **111** (5), 1245 (1958).
- [11] Л.А. Делимова. ФТП, **20** (12), 2188 (1986).
- [12] Ф.Т. Васько, М.В. Стриха. ФТП, **24** (7), 1227 (1990).
- [13] K.L. Shaklee, R.E. Nahory. Phys. Rev. Lett., **24** (17), 942 (1970).
- [14] F.A. Jonson. Proc. Phys. Soc., **73**, 181 (1959).
- [15] D.E. Aspnes, A.A. Stunda. Phys. Rev. B, **27**, 985 (1963).

Редактор Т.А. Полянская

Investigation directed by uniaxial stress linear dichroism in crystals of silicon

E.F. Venger, I.E. Matyash, B.K. Serdega

Institute of Semiconductor Physics
National Academy of Sciences of Ukraine,
03028 Kiev, Ukraine

Abstract The spectral characteristics of a linear dichroism in uniaxially deformed samples of silicon in a range of edge absorption were measured by method of polarization modulation. A fine structure of spectra, connected with participation of acoustical and optical phonons in band-to-band transitions under action of linearly polarized radiation was detected. From characteristics of the transmission and dichroism, the spectral characteristic of the change of absorption constant containing the phonon features was calculated. The phenomenological analysis of process of polarization modulation has been done from which follows that the spectral characteristic of dichroism value is a derivative on absorption constant with regard to the transmission function.