

Влияние свободных носителей заряда на дихроизм, отражение и пропускание в анизотропных пористых слоях кремния

Дэн Инин,^{*} В.Ю. Тимошенко[†]

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра физики низких температур и сверхпроводимости
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2*

(Поступила в редакцию 10.06.2024; подписана в печать 05.07.2024)

Проведен теоретический анализ вклада свободных носителей заряда в оптические свойства в инфракрасной области спектра пористых кремниевых слоев микрометровой толщины, состоящих из анизотропных нанокристаллов кремния. Результаты расчетов в рамках обобщенной модели эффективной среды с учетом анизотропии формы нанокристаллов кремния и процессов взаимодействия электрического поля световой волны с подвижными носителями заряда в нанокристаллах свидетельствуют о сильной зависимости поляризационной анизотропии коэффициентов отражения, поглощения и пропускания пленок кремния от концентрации свободных носителей заряда. В случае концентрации носителей заряда в диапазоне от 10^{16} до 10^{20} см⁻³ имеет место сильное двулучепреломление и линейный дихроизм (анизотропия поглощения), а также немонотонная зависимость разностного (для перпендикулярных направлений поляризации) показателя преломления, коэффициентов отражения и пропускания от концентрации носителей заряда. Полученные результаты полезны при разработке оптических переключателей и модуляторов сигналов в элементах кремниевой фотоники.

PACS: 42.25.Bs; 78.67.Bf; 81.05.Xj УДК: 53.06; 535.555.

Ключевые слова: оптические свойства, анизотропия формы, нанокристаллы, пористый кремний, носители заряда, кремниевая фотоника.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы кремниевая фотоника становится ключевой технологией для разных областей, таких как связь, оптические компьютеры и сенсоры [1, 2]. Её потенциальное применение варьируется от высокоскоростной оптической связи [3] до продвинутых квантовых информационных процессов и коммуникационных протоколов [4], высокопроизводительных нейроморфных вычислений [5] и интегрированных фотонных платформ [6].

Фундаментальное направление исследований в кремниевой фотонике связано с управлением свойствами кремниевых наноструктур, что имеет большое значение для расширения возможностей устройств, их производительности и функциональности в различных сферах применения. Чтобы управлять оптическими параметрами кремниевых наноструктур, изучались разные методы, например фототермический [7], механический [8], электромеханический [9] эффекты, материалы с фазовым переходом [10] и термооптический эффект [11]. Таким образом, формирование заданного оптического отклика играет ключевую роль в оптимизации наноструктур материалов и конфигураций фотонных устройств, что позволяет повысить такие характеристики, как чувствительность и быстродействие.

Пористый кремний (ПК) — материал с наноструктурой для создания одномерных фотонных кристаллов. У

него регулируемый показатель преломления, который зависит от пористости и может быть настроен с помощью условий изготовления [12]. Однако определение показателя преломления ПК затруднено из-за изменчивости морфологии. Для решения этой проблемы используется приближение эффективной среды Бруггемана [13–16].

Известно, что благодаря анизотропии формы составляющих его нанокристаллитов, ПК может проявлять сильное двулучепреломление, что означает различие показателей преломления для света с различным направлением линейной поляризации. Благодаря этому свойству ПК может использоваться в самых разных областях фотоники, включая оптические фильтры, датчики и сенсоры [17–19]. Для исследования двулучепреломления в пористых слоях кремния и изучения их оптических свойств используется модель Бруггемана [20–23], анализ расширяют, принимая во внимание воздействие окружающей среды, например окисление кремния [18]. Важным фактором, влияющим на оптическую анизотропию ПК, являются подвижные свободные носители заряда в кремниевых кристаллитах, концентрация которых может контролироваться и изменяться в широких пределах при введении легирующих примесей, адсорбции молекул и/или фотовозбуждения. В последнем случае становится возможным управление анизотропией оптических свойств при фотогенерации подвижных носителей заряда.

Несмотря на многочисленные исследования оптических характеристик ПК, влияние концентрации свободных носителей заряда в кремниевой матрице всё ещё недостаточно изучено. Понимание вклада свободных носителей заряда в оптическую анизотропию,

* yingying.d@outlook.com

† timoshen@physics.msu.ru

включая потери на поглощение свободными носителями и изменение показателя преломления, важно для моделирования и анализа фотонных устройств на основе ПК [24, 25]. Данная работа посвящена моделированию влияния концентрации свободных носителей заряда, изменяемой в диапазоне нескольких порядков по величине, на двулучепреломление, дихроизм, отражение и преломление света инфракрасного (ИК) диапазона в пористых кремниевых слоях микрометровой толщины.

1. ИСПОЛЬЗУЕМАЯ МОДЕЛЬ

ПК обычно синтезируют на подложках с ориентацией поверхности кремния (110). При электрохимическом травлении таких подложек в растворе плавиковой кислоты поры преимущественно образуются вдоль кристаллографических направлений [100] и [010], что придаёт ПК анизотропные свойства [17]. Оптические свойства слоя анизотропного ПК обычно моделируют с помощью ансамблей эллипсоидов вращения, состоящих из нанокристаллов кремния и пор с одинаковыми коэффициентами деполяризации [20, 21]. Падающая световая волна проходит и отражается от плёнки пористого кремния, как схематично показано на рис. 1.

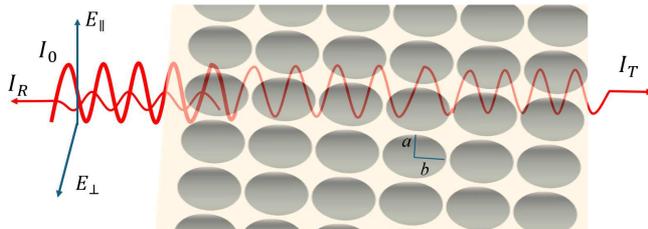


Рис. 1. Схематическое изображение световой волны прошедшей и отраженной от плёнки пористого кремния, состоящей из нанокристаллов кремния в виде эллипсоидов с полуосями a и b

В используемой модели слои ПК рассматриваются как композитная среда, состоящая из ансамбля эллипсоидов из кристаллического кремния с варьируемой анизотропией формы с различными соотношениями полуосей, разделенных пустотами (порами). Использовалось приближение эффективной среды Бруггемана для моделирования комплексной диэлектрической функции с учетом концентрации свободных носителей по модели Друде [22]. Численное моделирование проводилось в диапазоне концентраций свободных носителей от значений, характерных для слаболегированного кремния, до высоких уровней, типичных для сильно легированных образцов или слоев ПК в условиях интенсивного фотовозбуждения. Расчет эффективной диэлектрической проницаемости проводился по

обобщенной формуле Бруггемана [20]:

$$P \frac{\varepsilon - \varepsilon_1}{\varepsilon + L(\varepsilon_1 - \varepsilon)} + (1 - P) \frac{\varepsilon - \varepsilon_2}{\varepsilon + L(\varepsilon_2 - \varepsilon)} = 0 \quad (1)$$

где P — пористость, ε — эффективная диэлектрическая проницаемость, $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — диэлектрические функции пор и нанокристаллов соответственно, L — коэффициент деполяризации, зависящий от направления электрического поля по отношению к основным осям эллипсоидов, которыми моделировалась форма нанокристаллов кремния.

Коэффициенты деполяризации, определяющие оптические свойства слоя ПК, отражают эффективность экранирования внешних электромагнитных полей внутри эллипсоидов, характеризующихся симметричными осями вдоль направления [001] и направления $[1\bar{1}0]$ в плоскости слоя [22] и зависят от соотношения полуосей эллипсоидов. В случае, когда направление электрического поля совпадает с осью вращения, коэффициенты деполяризации определяются выражением [26]:

$$L_{||} = \frac{1}{1 - x^2} \left(1 - x \frac{\arcsin \sqrt{1 - x^2}}{\sqrt{1 - x^2}} \right), \quad L_{\perp} = \frac{1 - L_{||}}{2}, \quad (2)$$

где $x = a/b$, a, b — величины полуосей, направленных вдоль направлений $[1\bar{1}0]$ и $[001]$ соответственно.

Учитывая, что размеры нанокристаллов в мезопористых слоях составляют примерно 10 нм или больше, при изучении поведения носителей заряда можно пренебречь квантово-размерными эффектами. Это позволяет эффективно описать ИК-оптические свойства с помощью классической модели Друде [20]:

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\tau^{-1}}, \quad (3)$$

где ε_{∞} — высокочастотная диэлектрическая проницаемость ($\varepsilon_{\infty} = 11.7$ для c-Si), ω — частота падающего излучения, τ — время релаксации квазимпульса носителей заряда, ω_p — плазменная частота ($\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 N_p}{m^* \varepsilon_0}}$), e — элементарный заряд, N_p — концентрация свободных носителей заряда (дырок в случае материала p -типа проводимости), m^* — эффективная масса носителя заряда, ε_0 — диэлектрическая постоянная в системе СИ.

Двулучепреломление Δn и дихроизм $\Delta \alpha$ обозначают различия в показателях преломления и коэффициент ахотического поглощения для световой волны, поляризованной вдоль разных пространственных направлений. Эти параметры играют ключевую роль в определении оптических анизотропий пленки ПК при направлении вектора электрического поля световой волны вдоль кристаллографических направлений $[1\bar{1}0]$ и $[001]$ соответственно. Показатель преломления и его разность определяются с помощью следующих выражений:

$$n_{||, \perp} = \sqrt{\varepsilon_{||, \perp}}, \quad (4)$$

$$\Delta n = |n_{\perp} - n_{\parallel}|. \quad (5)$$

Коэффициенты поглощения ПК можно выразить через соответствующие компоненты мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости, используя известное соотношение:

$$\alpha_{\parallel, \perp} = \frac{2\omega}{c} \text{Im} \sqrt{\varepsilon_{\parallel, \perp}}. \quad (6)$$

Коэффициенты отражения на границе ПК/воздуха при нормальном падении могут быть выражены следующим образом:

$$R_{\parallel, \perp} = \left(\frac{1 - n_{\parallel, \perp}}{1 + n_{\parallel, \perp}} \right)^2. \quad (7)$$

Разницу коэффициентов поглощения ($\Delta\alpha$), отражения (ΔR) и пропускания (ΔT) между двумя направлениями поляризации можно рассчитать с помощью соотношений:

$$\Delta\alpha = |\Delta\alpha_{\perp} - \Delta\alpha_{\parallel}|, \quad \Delta R = |\Delta R_{\perp} - \Delta R_{\parallel}|, \quad (8)$$

$$\Delta T = |\Delta T_{\perp} - \Delta T_{\parallel}|.$$

При моделировании полного отражения свободного слоя ПК крайне важно учитывать возможность интерференции Фабри–Перо внутри слоя [27]. Чтобы точно учесть вклад интерференции в спектр $R_{\parallel, \perp}^{\Sigma}$, мы опираемся на выражение для интенсивности отраженного света в присутствии многолучевой интерференции и поглощения:

$$R_{\parallel, \perp}^{\Sigma} = R_{\parallel, \perp} \left(1 + \frac{(1 - R_{\parallel, \perp})^2 e^{-2\alpha_{\parallel, \perp} d}}{1 - R_{\parallel, \perp}^2 e^{-2\alpha_{\parallel, \perp} d}} \right), \quad (9)$$

где d — толщина пленки.

Кроме того, в случае тонкой пленки, когда происходит многократное отражение от её поверхностей, коэффициент пропускания определяется как сумма бесконечного числа членов убывающей геометрической прогрессии:

$$T_{\parallel, \perp}^{\Sigma} = \frac{(1 - R_{\parallel, \perp}^{\Sigma})^2 e^{-\alpha_{\parallel, \perp} d}}{1 - R_{\parallel, \perp}^{\Sigma 2} e^{-2\alpha_{\parallel, \perp} d}}. \quad (10)$$

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Чтобы численно промоделировать зависимости двулучепреломления Δn и дихроизма $\Delta\alpha$ от концентрации свободных носителей заряда, были использованы уравнения (6) и (7) в диапазоне концентраций носителей от $1 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ до $1 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$, а также величины параметра анизотропии x от 0 до 1.6. Соответствующие результаты для величин двулучепреломления и дихроизма показаны на рис. 2.

Наблюдаемые зависимости двулучепреломления и дихроизма от концентрации носителей заряда

объясняются тем, что показатель преломления зависит от действительной и мнимой частей компонент комплексной диэлектрической проницаемости ε . При этом коэффициент поглощения света свободными носителями заряда пропорционален мнимой части ε и линейно зависит от концентрации носителей.

Разности показателей преломления Δn демонстрирует слабую зависимость от N_p при низких концентрациях носителей заряда. Однако при концентрациях, превышающих $1 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, наблюдается монотонное уменьшение Δn с ростом N_p , и изменение тенденции происходит при $N_p > 4 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Это указывает на нелинейную взаимосвязь между Δn и N_p , особенно заметную при высоких концентрациях носителей (рис. 2, а). Кроме того, из рисунка видно, что максимальные значения Δn достигаются при $x = 0$, то есть для нанокристаллов в форме нитей, а минимальные значения при $x = 1.3$. Последнее значение соответствует минимальной из рассмотренных величине анизотропии (30% различие в длине полуосей эллипсоида), а при величине $x = 1.6$ анизотропия формы больше. При уменьшении анизотропии формы нанокристаллов величина двулучепреломления, очевидно, будет снижаться. Степень анизотропии существенно влияет на величину двулучепреломления, причём более низкие уровни анизотропии соответствуют более высоким значениям Δn .

Из рис. 2, б видны линейные зависимости $\Delta\alpha$ от N_p , поскольку значения α при эквивалентных концентрациях носителей почти пропорциональны мнимым частям соответствующих компонент ε . В то время как дихроизм монотонно увеличивается с ростом концентрации носителей заряда, значение двулучепреломления демонстрирует немонотонное поведение. Это можно объяснить приближением частоты плазменных колебаний к анализируемой частоте инфракрасного диапазона спектра.

Разностные спектры отражения ΔR (рис. 2, в) демонстрируют относительно стабильное поведение при изменении концентрации носителей, с заметным минимумом вблизи концентрации носителей $4 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$. В отличие от этого, изменение разности спектров пропускания ΔT (рис. 2, г) сначала медленно увеличивается, достигая максимума около $N_p \approx 1 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, после чего быстро снижается при дальнейшем увеличении концентрации носителей. Эти результаты подчёркивают немонотонную связь оптической анизотропии отклика в области вблизи плазменной частоты.

На рис. 3 показан контурный график $\Delta\alpha$ для пленки ПК в зависимости от концентрации свободных носителей и параметра анизотропии. При изменении анизотропии от 0 до 2, т.е. от нанокристаллитов в форме нанонитей к плоскостям, изменение амплитуды $\Delta\alpha$ проявляет монотонную зависимость. В диапазоне анизотропии, близком к 1 ($x \approx 0.9 - 1.1$), дихроизм остается постоянным, несмотря на изменение концентрации носителей.

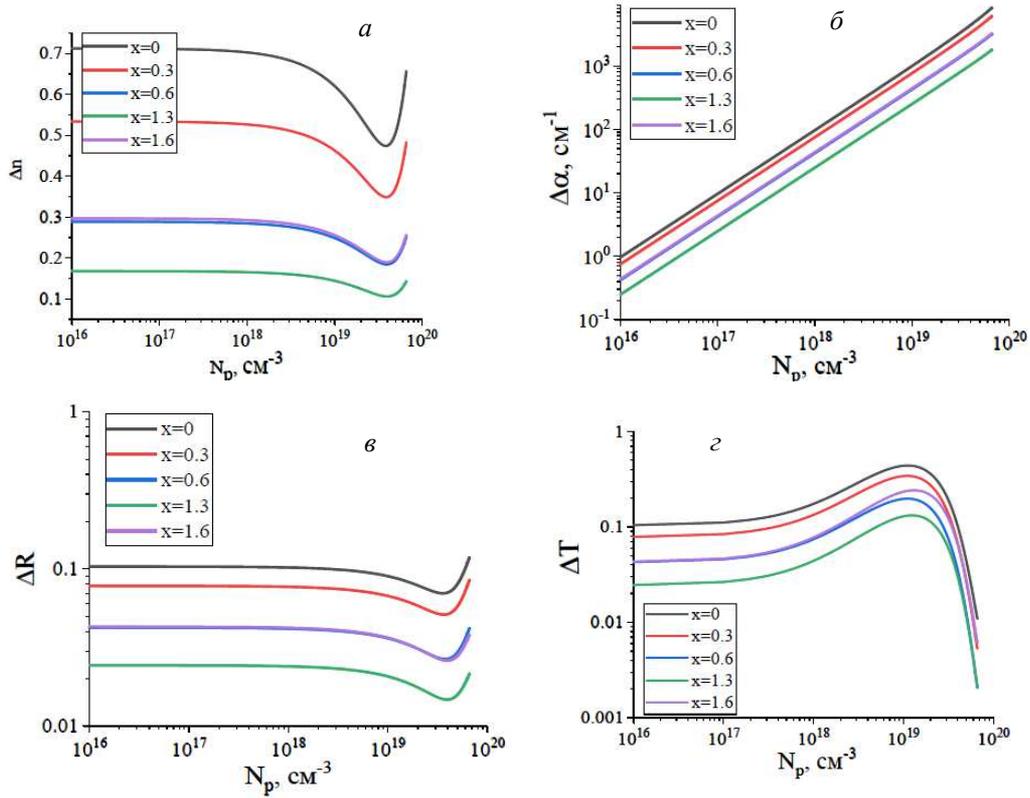


Рис. 2. Зависимости величины (а) двулучепреломления, (б) дихроизма, (в) разности коэффициентов отражения ΔR , (г) разности коэффициентов пропускания ΔT от концентрации свободных носителей заряда в пленке ПК ($P = 60\%$) с различными параметрами анизотропии формы нанокристаллитов кремния: $x = 0, 0.3, 0.6, 1.3$ и 1.6 для ИК излучения с $\omega = 1000 \text{ см}^{-1}$, $\tau = 800 \text{ см}^{-1}$, $d = 10 \text{ мкм}$

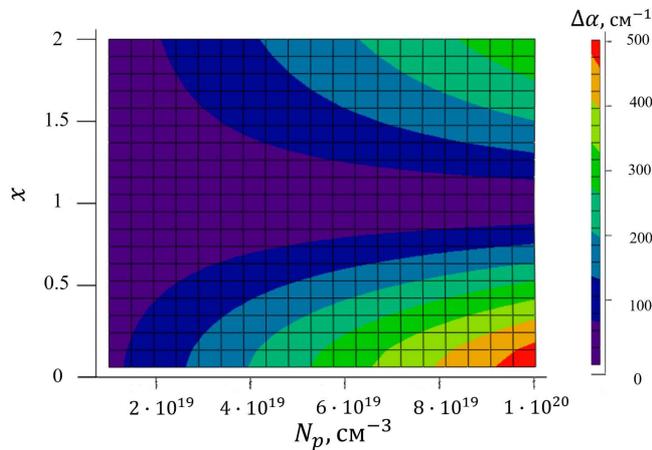


Рис. 3. Контурный график дихроизма $\Delta\alpha$ для мембраны ПК в зависимости от концентрации свободных носителей и коэффициента анизотропии формы нанокристаллов x ($P = 60\%$, $\omega = 10000 \text{ см}^{-1}$, $\tau = 2000 \text{ см}^{-1}$)

Результаты расчётов показали значительное влияние концентрации свободных носителей на оптические свойства слоёв ПК. Увеличение концентрации свободных носителей привело к усилению дихроизма ПК,

который характеризуется дифференциальным поглощением света вдоль разных осей эллипсоида. Этот эффект объясняется взаимодействием между свободными носителями и электромагнитным полем, которое модулируется пористой структурой кремниевой матрицы. Полученные данные хорошо согласуются с результатами измерений оптических свойств, представленными в предыдущих работах [21, 22].

Чтобы описать коэффициенты отражения и пропускания, необходимо одновременно принимать во внимание многолучевую интерференцию и поглощение в мезо-ПК слоях. Изменения ΔR^Σ и ΔT^Σ в зависимости от концентрации свободных носителей заряда для пяти различных толщин показаны на рис. 4. Заметно, что при увеличении концентрации свободных носителей происходит очевидное уменьшение ΔR^Σ и увеличение ΔT^Σ . Эти два спектра монотонно изменяются в зависимости от толщины пленки ПК.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе проведен численный анализ оптических свойств анизотропных пористых слоёв кремния, содержащих свободные носители заряда,

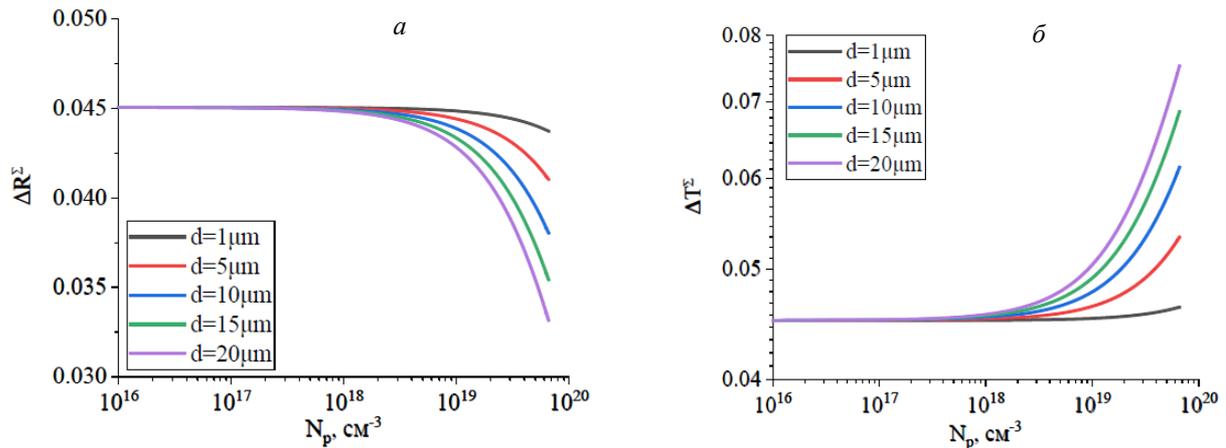


Рис. 4. *а* — Разностные величины отражения ΔR^Σ ($\Delta R^\Sigma = |\Delta R_\perp^\Sigma - \Delta R_\parallel^\Sigma|$) для пленки ПК в присутствии многолучевой интерференции и поглощения ($P=55\%$, отношение полуосей $x = 1.33$, $d = 1, 5, 10, 15, 20$ мкм, $\omega = 10000$ см $^{-1}$, $\tau = 700$ см $^{-1}$). *б* — Разностные величины пропускания ΔT^Σ ($\Delta T^\Sigma = |\Delta T_\perp^\Sigma - \Delta T_\parallel^\Sigma|$) для пленки ПК с учетом многократных отражений от поверхностей пленки с теми же параметрами, что и выше

в инфракрасной области спектра. Результаты моделирования указывают на важность учёта многолучевой интерференции и поглощения в слое ПК для более точного описания отражения и пропускания. Увеличение концентрации носителей заряда в кремниевых нанокристаллах в диапазоне $N_p = (1 \div 5) \times 10^{19}$ см $^{-3}$, которое вполне достижимо благодаря их легированию или оптическому возбуждению, приводит к росту величины разности коэффициентов пропускания и отра-

жения для волн, поляризованных в направлении вдоль и перпендикулярно оптической оси, что означает рост величины двулучепреломления и линейного дихроизма. Наблюдаемое изменение разностного пропускания и отражения, обусловленное вкладом подвижных носителей заряда, открывает возможности для разработки оптических переключателей и модуляторов для обработки оптических сигналов в кремниевой фотонике.

- [1] Baets R., Rahim A. // Opt. Mater. Express **13**, N 12. 3439 (2023).
- [2] Shekhar S., Bogaerts W., Chrostowski L. et al. // Nat. Commun. **15**, N 1. 751. (2024).
- [3] Quack N., Takabayashi A.Y., Sattari H. et al. // Microsyst. Nanoeng. **9**, N 1. 27 (2023).
- [4] Prabhu M., Errando-Herranz C., Santis L.D. et al. // Nat. Commun. **14**, N 1. 7 (2023).
- [5] Pai S., Sun Z.H., Hughes T. et al. // Science **380**, N 6643. 398 (2023).
- [6] Churaev M., Wang R.N., Riedhauser A. et al. // Nat. Commun. **14**, N 1. 3499 (2023).
- [7] Zhang T., Che Y., Chen K. et al. // Nat. Commun. **11**, N 1. 3027 (2020).
- [8] Kim Y.J., Yoo Y.J., Kang M.H. et al. // Nanophotonics. **9**, N 10. 3287 (2020).
- [9] Holsteen A.L., Raza S., Fan P.Y. et al. // Science **358**, N 6369. 1407 (2017).
- [10] Wang Q., Rogers E., Gholipour B. et al. // Nat. Photonics **10**, N 16. 60(2016).
- [11] Assadillayev A., Hinamoto T., Fujii M. et al. // Nat. Photonics. **10**, N 10. 4161 (2021).
- [12] Estrada-Wiese D., del Rio J.A. // Rev. Mex. Fis. **64**, N 1. 72 (2018).
- [13] Niklasson G.A., Granqvist C.G., Hunderi O. // Appl. Opt. **20**, N 1. 26 (1981).
- [14] Kochergin V., Christophersen M., Full H. // Appl. Phys. B **79**, N 6. 731 (2004).
- [15] Bergner B., Germer T., Suleski T. // J. Opt. Soc. Am. A **27**, N 5. 1083(2010).
- [16] Hou S., Guo Z., Xiong T. et al. // Nano Res. **15**, N 9. 8579 (2022).
- [17] Diener J., Kьnzner N., Kovalev D. et al. // Appl. Phys. Lett. **78**, N 10. 3887 (2001).
- [18] Alvarez J., Bettotti P., Subrez I. et al. // Opt. Express **19**, N 27. 26106(2012).
- [19] Ocier C.R., Richards C.A., Bacon-Brown D.A. et al. // Opt. Mater. Express **10**, N 4. 868 (2020).
- [20] Timoshenko V.Y., Osminkina L.A., Efimova A.I. et al. // Phys. Rev. B **67**, N 11. 113405 (2003).
- [21] Kuznetsova L.P., Efimova A.I., Osminkina L.A. et al. // Phys. Solid State **44**, N 5. 811 (2002).
- [22] Sekerbayev K.S., Taurbayev Y.T., Efimova A.I. et al. // Semicond. **51**, N 8. 1047 (2017).
- [23] Kьnzner N., Gross E., Diener J. et al. // J. Appl. Phys. **94**, N 8. 4913 (2003).
- [24] Singh A. // Proc. IEEE Int. Conf. Group IV Photon. 102 (2010).

- [25] *Marris-Morini D., Roux X. L., Vivien L. et al. // Opt. Express* **14**, N 22. 10838 (2006).
[26] *Smith R.L., Collins S.D. // J. Appl. Phys.* **71**, N 8. R1 (1992).
[27] *Osminkina L.A., Kurepina E.V., Paolikov A.V. et al. // Semicond.* **38**, N 5. 581 (2004).

Effect of free charge carriers on dichroism, reflectance and transmittance in anisotropic porous silicon layers

Yingying Deng^a, V.Yu. Timoshenko^b

Department of Low Temperature Physics and Superconductivity, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia

E-mail: ^ayingying.d@outlook.com, ^btimoshen@physics.msu.ru

Theoretical analysis has been conducted to investigate the contribution of free charge carriers to the optical properties in the infrared region of micrometer-thick porous silicon layers composed of anisotropic silicon nanocrystals. Calculations based on a generalized effective medium model, which accounts for the anisotropic shape of silicon nanocrystals and the interaction between the electric field of a light wave and mobile charge carriers in the nanocrystals, indicate a strong dependence of the polarization anisotropy of the reflection, absorption, and transmission coefficients of silicon films on the concentration of free charge carriers. For charge carrier concentrations ranging from 10^{16} to 10^{20} cm⁻³, significant birefringence and linear dichroism (absorption anisotropy) are observed, along with a non-monotonic dependence of the refractive index, reflection, and transmission coefficients on the concentration of charge carriers. These findings can be applied to develop optical switches and modulators for processing optical signals in silicon photonic elements.

PACS: 42.25.Bs; 78.67.Bf; 81.05.Xj

Keywords: optical properties, shape anisotropy, porous silicon, nanocrystals, mobile charge carriers, silicon photonics.

Received 10 June 2024.

Сведения об авторах

1. Дэн Инин — аспирант; e-mail: yingying.d@outlook.com.
2. Тимошенко Виктор Юрьевич — доктор физ.-мат. наук, профессор; тел.: (495) 939-59-04, e-mail: timoshen@physics.msu.ru.