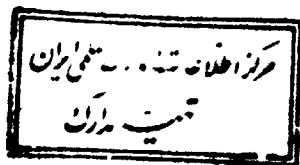
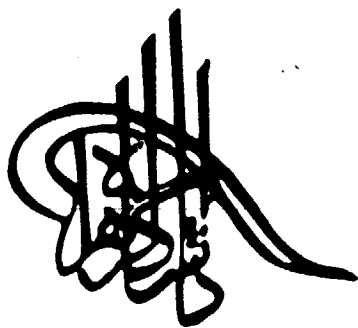


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

٢٧٩٨٥

۱۳۷۸ / ۱۳۲ / ۱۰



دانشگاه الزهراء

5357

دانشکده علوم پایه

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

رشته فیزیک

عنوان

خواص نوری سیلیکان متخلخل

استاد راهنما

دکتر رضائات داریانی

استاد مشاور

دکتر عبدالله مرتضی علی

دانشجو

حکیمه نورانی

شهریورماه ۱۳۷۸

۲۷۶۸۵

چکیده

سیلیکان متخلخل (PS) بر اثر آندیزاسیون الکتروشیمیایی روی ماده سیلیکان بوجود می آید. تاکنون تحقیقات فراوانی درباره چگونگی تشکیل این ماده و خواص نوری آن بویژه فوتولومینسانس (PL) آن شده، اما هنوز سازوکار دقیق آنها شناخته نشده است. در این پایان نامه ابتدا ساختار و خواص نوری سیلیکان بیان می شود. سپس تحقیقات و مدل‌های پیشنهاد شده در مورد تشکیل PS و منشأ PL آن مرور می شود. پس از آن نظریه پراکندگی نور از سطوح ناهموار تصادفی و هم چنین انعکاس و پراکندگی، جذب و عبور نور از این ماده بررسی می شود. در پایان آزمایشهایی را که انجام داده ایم شرح می دهیم. این آزمایشها شامل روشهای مختلف ساخت نمونه، فوتولومینسانس، انعکاس و پراکندگی، حل کردن لایه، جداکردن لایه، تعیین درصد تخلخل و بررسی جذب و عبور از آنها می باشد.

فهرست مطالب

مقدمه

۱	فصل اول : ساختار کریستالی و خواص نوری سیلیکان
۱	۱-۱- ساختار کریستالی سیلیکان
۳	۲-۱- نوارهای انرژی سیلیکان
۴	۳-۱- فرآیندهای جذب در نیمه رساناها
۶	۴-۱- نمودارهای پراکندگی فونون
۷	۵-۱- خواص نوری سیلیکان
۷	۱-۵-۱- جذب نوری در سیلیکان خالص
۸	۲-۵-۱- جذب به کمک فونون
۱۱	۳-۵-۱- لبه جذب
۱۵	۴-۵-۱- جذب مستقیم
۱۷	۶-۱- انواع لومینسانس
۱۸	۷-۱- فوتولومینسانس در سیلیکان
۱۹	۸-۱- مقایسه روشهای جذب و فوتولومینسانس
۲۰	فصل دوم : ساختار سیلیکان متخلخل
۲۰	۱-۲- ریخت شناسی سیلیکان متخلخل
۲۲	۲-۲- مدل‌های تشکیل سیلیکان متخلخل
۲۳	۱-۲-۲- مدل بیل
۲۴	۲-۲-۲- مدل پنخس محدود
۲۵	۳-۲-۲- مقایسه دو مدل بیل و پنخس محدود

۲۷	۲-۲-۴- مدل کوانتمی
۳۱	۲-۲-۵- مدلی براساس نفوذ هیدرژن
۳۲	۲-۳- انواع ساختار متخلخل
۳۴	فصل سوم : فوتولومینسانس سیلیکان متخلخل
۳۵	۳-۱- مدل‌های فوتولومینسانس سیلیکان متخلخل
۳۵	۳-۱-۱- مدل‌های شیمیایی
۳۸	۳-۱-۲- مدل محدودیت کوانتمی
۴۸	۳-۱-۳- مدل مربوط به حالت‌های واسطه
۵۳	۳-۱-۴- منشأ فوتولومینسانس قرمز و آبی
۵۵	۳-۲- کارآیی کوانتمی سیلیکان متخلخل
۵۷	فصل چهارم : خواص نوری سیلیکان متخلخل
۵۷	۴-۱- نظریه پراکندگی از سطوح ناهموار
۵۸	۴-۱-۱- رابطه فاز و پراکندگی
۶۰	۴-۱-۲- آمار سطوح ناهموار
۶۲	۴-۱-۳- نظریه کیرشهف در پراکندگی
۶۶	۴-۲- انعکاس و پراکندگی از سیلیکان متخلخل
۷۱	۴-۳- جذب و عبور در سیلیکان متخلخل
۸۰	فصل پنجم : کارهای تجربی و آزمایش‌های انجام شده
۸۰	۵-۱- روش ساخت نمونه
۸۶	۵-۲- مشاهده نمونه ها زیر میکروسکوپ نوری
۸۶	۵-۳- فوتولومینسانس نمونه ها
۸۹	۵-۴- انعکاس و پراکندگی نور از سطح نمونه ها

- ۸۹ ۱-۴-۵- تغییرات شدت نور لامپ جیوه برحسب طول موج
- ۹۰ ۲-۴-۵- مقایسه شدت انعکاس Si و نمونه های مختلف
- ۹۱ ۳-۴-۵- انعکاس نوعی نمونه ها
- ۹۲ ۴-۴-۵- تغییرات نسبی انعکاس برحسب طول موج
- ۹۵ ۵-۴-۵- تغییرات شدت انعکاس سیلیکان و سینیکان متخلخل برحسب زاویه
- ۹۶ ۶-۴-۵- تغییرات شدت انعکاس برحسب زاویه پراکندگی
- ۹۷ ۵-۵- جذب و عبور لایه سیلیکان متخلخل
- ۹۸ ۱-۵-۵- حل کردن لایه
- ۹۹ ۲-۵-۵- جداکردن لایه
- ۱۰۰ ۳-۵-۵- تعیین درصد تخلخل
- ۱۰۱ ۴-۵-۵- جذب و عبور محلول سیلیکان متخلخل
- ۱۰۵ ۵-۵-۵- تغییرات I-V نمونه ها حین ساخت
- ۱۰۶ نتیجه گیری و پیشنهاد
- ۱۰۸ پیوستها

مقدمه

سیلیکان در صنعت الکترونیک و نیمه رسانا نقش اساسی دارد. برتری آن نسبت به سایر نیمه رساناها مربوط به ماهیت ممتاز خواص عملیاتی و فن آوری بنیادی و عظیمی است که حول و حوش آن گسترش یافته است. نیمه رساناهای دیگر نمی توانند به عنوان ماده برگزیده در کاربردهای الکترونیکی جانشین سیلیکان شوند. باوجود این کارایی گسیل نوری این ماده پایین است و به همین دلیل کاربرد اپتیکی چندانی ندارد.

مدهاست که اهمیت پیشرفت فن آوری که به کمک آن بتوان ابزارهای نوری و الکترونیکی را به صورتی ساده و ارزان روی ویفر سیلیکان مجتمع کرد، معلوم شده است. چنین پیشرفتی تأثیر بسیار زیادی روی ارتباطات، کامپیوتر و فن آوریهای وابسته به آن خواهد داشت. البته مجتمعهای اپتوالکترونیکی روی ویفرهای سیلیکان تا حدودی ایجاد شده است. مثلاً می توان آشکارسازهای نوری دارای کیفیت بالا از این ماده ساخت. اما در حال حاضر برای ایجاد اجتماع کامل اپتیک و الکترونیک باید دیودهای نورگسیل (LED) و لیزرهای نیمه رسانا روی ویفر مشترکی قرار گیرند تا این ویفر شامل مؤلفه های نوری و الکترونیکی باشد. امروزه ابزارهای نیمه رسانای نورگسیل تقریباً فقط از نیمه رساناهای مرکب که دارای شکاف ممنوعه مستقیم هستند مثل گالیم آرسناید و فسفید ایندیم ساخته می شود که کارایی نوری آنها از سیلیکان بیشتر است.

یکی از راه حلهای این مشکل افزایش کارایی نوری مواد سازگار با سیلیکان است که علیرغم تحقیقات گسترده در این مورد کارایی بالایی از این مواد دردمای اتاق بدست نیامده است. راه حل دیگر افزایش کارایی نوری خود سیلیکان است.

اوهرلر [۱] در سال ۱۹۵۶ سیلیکان متخلخل را در ضمن مطالعه روشهای الکتروشیمیایی برای جلا دادن سیلیکان کشف کرد. در سال ۱۹۹۰ کهنم [۲] گزارش داد که لایه های سیلیکان

متخلخل (PS) ساخته شده روی سطح ویفر سیلیکان دردمای اتاق فوتولومینسانس مرئی دارند.

خواص نوری که وی گزارش داده بود به چند دلیل مورد توجه بودند:

۱) انرژی نور گسیل شده بیشتر از انرژی شکاف ممنوعه سیلیکان حجمی بود.

۲) باتغییر دادن شرایط ساخت PS میتوان انرژی (رنگ) نورگسیل شده را درگستره نور مرئی

تغییر داد.

۳) کارآیی کوانتومی این ماده با کارآیی نیمه رساناهای مرکب که دارای شکاف ممنوعه مستقیم

هستند، قابل مقایسه می باشد.

گزارش کنهم که نوید ایجاد فن آوری اپتوالکترونیکی برپایه ماده سیلیکان را می داد،

باعث شروع تحقیقات گسترده ای در این مورد شد. [۳]

دراین پایان نامه بخشی از تحقیقات انجام شده درباره ساختار و فوتولومینسانس سیلیکان

متخلخل ومدلهای مختلف ارائه شده دراین مورد بیان می شود. سپس تئوری پراکندگی از

سطوح ناهموار و خواص نوری این ماده (انعکاس و پراکندگی، جذب و عبور) بررسی شده و

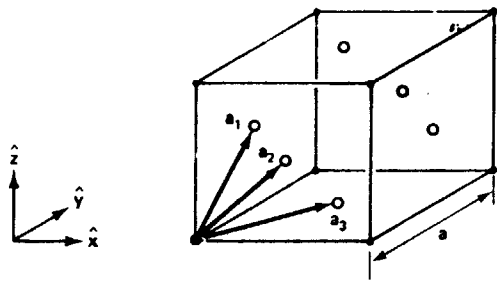
سرانجام کارهای عملی انجام شده برروی نمونه هایی که ساخته ایم ارائه می شود.

فصل اول

ساختار کریستالی و خواص نوری سیلیکان

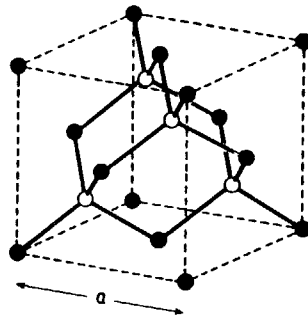
۱-۱- ساختار کریستالی سیلیکان

سیلیکان (Si) که دارای عدد اتمی ۱۴ می باشد در گروه چهارم و ردیف سوم جدول تناوبی قرار دارد. در شبکه آن (شکل ۱-۱) هر اتم با چهار اتم همسایه نزدیکش پیوند کوالانسی برقرار می کند. زاویه بین این پیوندها $28'$ و 109° است. این شبکه معادل دو شبکه fcc درهم فرورفته است. یکی از شبکه ها، مکعبی است که محدوده سلول واحد را نشان می دهد و دومی در امتداد قطر مکعب، به اندازه یک چهارم طول آن جابجا شده است.



شکل (۲-۱): یاخته بنیادی و بردارهای پایه

شبکه fcc [۵]



شکل (۱-۱): ساختار شبکه Si [۴]

یاخته بنیادی و بردارهای پایه شبکه مکعب fcc، یعنی \vec{a}_1 در شکل (۲-۱) نشان داده شده است که یاخته بنیادی شبکه سیلیکان می باشد، اما دو اتم درونش قرار گرفته اند. بنابراین شبکه Si از نظر تکنیکی پیچیده است. این یاخته دارای بسیاری از تقارنهای شبکه fcc است درحالیکه بعضی از تقارنها به علت وجود اتمهای اضافی از بین رفته است.

در تقریب الکترون آزاد، تابع موج الکترون را در نقطه $\vec{\Gamma}$ از شبکه تناوبی می توان به

صورت حاصلضرب موج تخت در تابعی باتناوب شبکه براوه نوشت:

$$\Psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1-1)$$

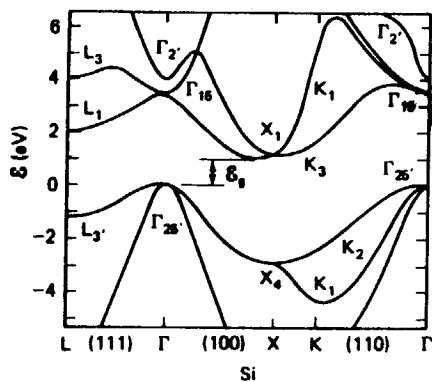
که در آن $u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$ در مورد همه مقادیر \vec{R} در این شبکه برقرار است. در رابطه بالا \vec{k} بردار موج و n شاخص نوار است. به ازای هر مقدار \vec{k} تعداد بیشماری ویژه حالت‌های مستقل وجود دارد. $E_{\vec{k}}$ سطوح انرژی متناظر با مقادیر مختلف \vec{k} و مقادیر یکسان n شامل نوار انرژی n ام را تشکیل می‌دهد.

اما انرژی و توابع موج الکترونها در شبکه و ارون بررسی می‌شود. شبکه و ارون تبدیل فوریه شبکه واقعی است و مجموعه ای از بردارهای موج \vec{K} است که امواج تخت دارای تناوب شبکه براوه معین را می‌دهد. از نظر تحلیلی \vec{K} در صورتی متعلق به شبکه و ارون شبکه براوه نقاط \vec{R} است که شرط $e^{i\vec{K}(\vec{r} + \vec{R})} = e^{i\vec{K}\vec{r}}$ برای هر \vec{r} و \vec{R} شبکه براوه برقرار باشد. از شرط فوق می‌توان نتیجه گرفت که بردارهای شبکه و ارون در شرط $e^{i\vec{K}\vec{R}} = 1$ صدق می‌کنند [۶].

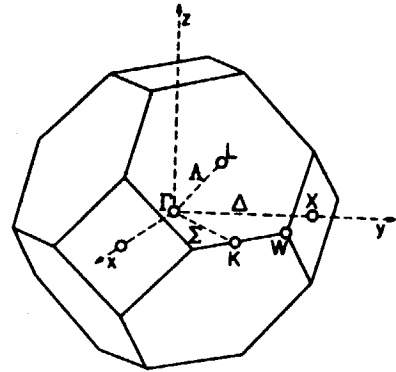
شبکه و ارون محدود به صفحاتی است که بر خطوط واصل بین یک نقطه معین شبکه و نقاط دیگر عمود هستند. کوچکترین حجم محدود به این صفحات منطقه اول بریلونن یا بطور ساده منطقه بریلونن (BZ) گفته میشود. و ارون شبکه fcc دارای ثابت شبکه a ، شبکه bcc با ثابت شبکه $\frac{2\pi}{a}$ است.

این منطقه با چهارده وجهی محصور شده است که ۶ وجه آن مربعی و ۸ وجه دیگر شش ضلعی هستند. در شکل (۱-۳) خطوط و نقاط مهم تقارن درون منطقه نشان داده شده است.

مرکز منطقه یعنی $[\Gamma = \frac{2\pi}{a}(0,0,0)]$ بیشترین تقارن را دارد. محورهای $\langle 111 \rangle$ (Λ) و محل تقاطعشان با لبه منطقه در $[L = \frac{2\pi}{a}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})]$ ، محورهای $\langle 100 \rangle$ (Δ) و تقاطعشان $[X = \frac{2\pi}{a}(0,0,1)]$ ، و محورهای $\langle 110 \rangle$ (Σ) و تقاطع آنها $[K = \frac{2\pi}{a}(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0)]$ ، خطوط و نقاط تقارن دیگر هستند. [۷]



شکل (۱-۴): ساختار نواری Si [۵].



شکل (۱-۳): منطقه BZ شبکه fcc [۷].

در این نقاط و در طول این خطوط، اطلاعات زیادی درباره نوارهای تشکیل شده با انرژیهای $E_{n\vec{k}}$ از تقارنهای موجود مستقیماً استخراج می شود. به دلیل این واقعیت و دشوار بودن نمایش هندسی تغییر این انرژیها به صورت تابعی از متغیر سه بعدی k ، روابط نوار انرژی معمولاً فقط در مقادیر مخصوص k که متناظر با نقاط و خطوط تقارن هستند نشان داده می شود.

۱-۲- نوارهای انرژی سیلیکان

ساختار نواری سیلیکان که به روش شبه پتانسیل محاسبه شده است در شکل (۱-۴) نشان داده شده است. نوارهای سطوح انرژی مجاز یعنی $E_{n\vec{k}}$ با مقادیر k متناظر با خطوط تقارن دلالت دارد. مبدأ انرژی یعنی انرژی صفر بطور دلخواه انتخاب می شود و با بالاترین انرژی نوار ظرفیت متناظر است. بنابراین انرژی نوارهای ظرفیت و رسانش به ترتیب منفی و مثبت در نظر گرفته می شوند. هر دو نوار انرژی از برهم نهی یا مجاورت چندین نوار پدید می آیند.

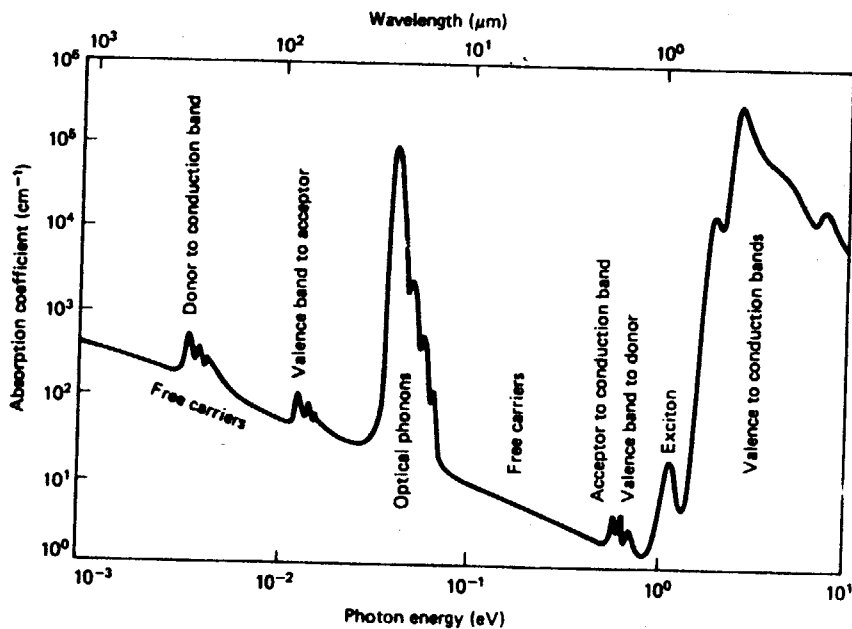
نقطه Γ در مرکز منطقه بریلوئن دارای بیشترین تقارن است. در این نقطه نوار ظرفیت پایین ترین سطح انرژی اش را دارد. بالاترین انرژی بعدی برای این مقدار k تبهگنی سه گانه دارد (صرفنظر از شکاف ارییتال- اسپین) که با Γ نشان داده می شود و متناظر با بیشینه انرژی نوار ظرفیت است. اگر از نقطه Γ به سمت نقاط با تقارن کمتر مثلاً Σ برویم، این تبهگنی از بین می رود هم چنانکه برای مقادیر k در طول محور تقارن Σ وجود دارد و

چهار نوار جداگانه ظرفیت در این جهت ظاهر می شوند. اما در جهت های Λ و Δ بالاترین نوار در هر حالت (به ترتیب Λ_3 و Δ_5) باتبستگی دوگانه باقی می ماند. بعد از Γ_{25} ، بیشترین انرژی رداشته و تبستگی آن سه گانه است. اختلاف انرژی این دو نقطه متناظر با انرژی شکاف ممنوعه سیلیکان است و مقدار تجربی آن $3/4 \text{ eV}$ است. با حرکت در طول جهت های $\langle 100 \rangle (\Delta)$ و $\langle 111 \rangle (\Lambda)$ و دور شدن از Γ انرژی نوار رسانش کاهش می یابد. تا به کمترین مقدار خود می رسد. شکاف ممنوعه Si مقدار انرژی بین بیشینه نوار ظرفیت و کمترین مقدار نوار رسانش است که حدود $0/8 \text{ X}$ بوده و در جهت $\langle 100 \rangle$ قرار دارد. این شکاف غیر مستقیم است چون برای گذار الکترون از این می نیمم یا کمینه نوار رسانش به بیشینه نوار ظرفیت تغییر k لازم است. این انرژی در محاسبه خواص فوتولتایی و الکترونی Si نقش عمده ای دارد. هم چنانکه در شکل (1-4) دیده می شود در نقاط معادل u و k در این لبه منطقه سطوح انرژی خیلی بزرگتر از این می نیمم نیستند. یک می نیم محلی هم چنین در لبه منطقه در جهت $\langle 111 \rangle$ بدست می آید. شکاف ممنوعه متناظر با این می نیم دومین شکاف ممنوعه غیر مستقیم می باشد.

در مرکز منطقه بریلونن یعنی Γ ، دومین می نیم انرژی در نوار رسانش متناظر با حالت غیر تبهگن Γ_2 است. حالت پایینی بعدی چند eV بالاتر است و بعید است تأثیر زیادی در خواص فوتولتایی داشته باشد.

1-3- فرآیندهای جذب در نیمه رساناها

هنگامی که پرتوهای نور به نیمه رسانا برخورد می کند، پدیده های انعکاس جذب و عبور مشاهده می شود. از این اثرات نوری اطلاعات بسیاری درباره ساختار نوار انرژی و فرآیندهای الکترونی نیمه رسانا بدست می آوریم. شکل زیر طیف فرضی جذب نیمه رسانایی نوعی را برحسب انرژی فوتون تابیده نشان می دهد.



شکل (۱-۵): طیف جذب فرضی

نیمه رسانای نوعی [۵].

همانطور که دیده می شود می توان فرآیندهای زیر را به جذب نسبت داد:

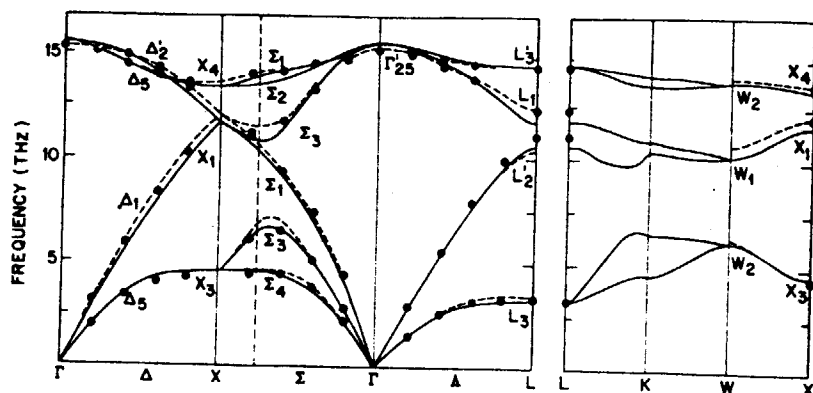
فوتونهایی که انرژی زیادی دارند در اثر گذارهای الکترون از حالت های نوار ظرفیت پر به حالت های نوار رسانش خالی جذب می شوند. این گذار ممکن است مستقیم یا غیرمستقیم باشد. این فرآیند شدیداً تحت تأثیر آلاینده گی یا ناخالصی، حرارت و میدان الکتریکی و مغناطیسی قرار دارد. فوتونهایی که انرژی شان درست زیر لبه جذب بنیادی قرار دارد، بر اثر تشکیل اکسایتونها و گذارهای الکترون بین نوارها و حالت های ناخالصی، جذب می شوند. در دماهای به اندازه کافی پایین برهم کنش کولنی بین الکترون و حفره باعث بستگی این دو باهم شده و شبه ذره ای به نام اکسایتون را بوجود می آورد. اگر انرژی تابش فرودی آنقدر کم باشد که نتواند جفت الکترون-حفره یا اکسایتون ایجاد کند، فرآیند جذب دیگری می تواند روی دهد. یعنی الکترونهای نوار رسانش یا حفره های نوار ظرفیت فوتون تابیده را جذب کرده، زمینه جذب پایین تر از لبه جذب بنیادی را فراهم می کنند که با افزایش طول موج افزایش می یابد. در این فرآیند میدان الکتریکی تابش فرودی، به حامل های آزاد شتاب می دهد که آنها هم به نوبه خود بر اثر برخورد با شبکه، حرکتشان آهسته می شود. این

فرآیندها عموماً بر اثر افزایش غلظت حاملهای آزاد ناشی از ورود ناخالصی یا افزایش دما شدت بیشتری می یابد. جذب شبکه شامل برهم کنش نور با حرکت نوسانی شبکه کریستالی است. شکل نوار جذبی مربوط به فونونهای اپتیکی یا نوری را نشان می دهد. شدت آن تقریباً به اندازه شدت جذب مربوط به گذارهای بین نواری است. این جذب مربوط به دوقطبی الکتریکی جفت شده بین فوتونها و فونونها می باشد. از آنجا که فوتونها امواج عرضی هستند با فونونهای اپتیکی عرضی قویاً جفت می شوند. [5]

۱-۴- نمودارهای پراکندگی فونون

اتمهای شبکه حتی در دماهای بسیار پایین حول وضعیت تعادل خود نوساناتی دارند. این امواج ارتعاشی را می توان با بردارهای موج \vec{q} مشخص کرد که باید همان شرط تناوبی کریستال را داشته باشند [۴]. حرکت نوسانی اتمهای شبکه را می توان به صورت برهم نهی امواج تخت منتشر شده به شکل $\delta\vec{r} = u_{\vec{q}\alpha} e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r} - \omega_{\vec{q}\alpha}t)}$ نشان داد. \vec{r} مکان تعادل اتمهای معین، $\omega_{\vec{q}\alpha}$ بسامد یا فرکانس زاویه ای مد موج مورد نظر، t زمان و α مدهای موج دارای شاخص یکسان است. به ازای هر مقدار \vec{q} سه مد برای هر اتم سلول بنیادی وجود دارد که دوتای آنها عرضی و یکی طولی است. اتم دوم در سلول بنیادی سیلیکان باعث می شود دو مجموعه از این سه مد ایجاد شود. بنابراین عملاً ۶ مد به ازای هر مقدار \vec{q} وجود دارد. مدها یا آکوستیکی هستند یا اپتیکی. مدهای آکوستیکی بسامد پایین دارند، حرکت آنها در جهت یکدیگر بوده و همفاز هستند و وقتی \vec{q} به سمت صفر میل می کند، این مدها به سمت صفر میل می کنند. مدهای اپتیکی بسامد بالا دارند، درخلاف جهت یکدیگر حرکت می کنند، اختلاف فاز آنها π است و با تغییر k چندان تغییر نمی کنند. بنابراین بطور کلی انواع مدهای فونون عبارتند از: آکوستیکی عرضی (TA)، آکوستیکی طولی (LA)، اپتیکی عرضی (TO) و اپتیکی طولی (LO).

شکل زیر منحنی پاشندگی فونون را نشان می دهد.



شکل (۱-۶): نمودار انرژی فونونها در Si [۹].

همانطور که دیده می شود مدهای عرضی در طول بیشتر خطوط تقارن نشان داده شده، به جز Σ تبهکن هستند.

بر طبق اثرهای کوانتمی کمترین تغییر در انرژی هر مد معین $\frac{h\omega}{2\pi}$ می باشد که h ثابت پلانک است، هم چنانکه در بخش قبل گفته شد می نیمم انرژی نوار رسانش در طول جهت $\langle 100 \rangle$ ، X به سمت مرکز منطقه قرار دارد. بردار موج مناسب نیز در شکل (۱-۶) نشان داده شده است. انرژیهای TA، LA، LO و TO به ترتیب ۱۸ meV، ۴ meV، ۵۵ meV و ۵۷ meV می باشد. مورد جالب دیگر، فونون LO در مرکز منطقه ($\bar{q} = 0$) است. این انرژی به عنوان انرژی فونون رامن معروف است و برای سیلیکان برابر با ۶۴ meV است.

۱-۵-۰- خواص نوری سیلیکان

در این بخش ارتباط نظریه نواری به شبکه کریستالی مرور شده و خواص تجربی Si با جزئیات بیشتر بیان می شود. هم چنین به مراحل جذب ضعیف برای انرژیهای فوتون که کمتر از انرژی شکاف ممنوعه هستند توجه می شود.

۱-۵-۰-۱- جذب نوری در سیلیکان خالص

سیلیکان طول موجهای کوتاه را بشدت جذب می کند که نشان دهنده بیشترین ضریب جذب است. انرژی فوتونهای متناظر با این طول موجها برای تحریک الکترونها، به طور مستقیم