

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет»
Институт математики, информационных технологий и физики
Кафедра теоретической и прикладной физики

И.В. Федотова, П.Н. Крылов

Оптические свойства материалов

Учебно-методическое пособие



Ижевск
2025

УДК 538.958(075.8)
ББК 22.374р30
Ф34

Рекомендовано к изданию Учебно-методическим советом УдГУ

Рецензент: д-р физ.-мат. наук, профессор, гл. науч. сотрудник ФГБУН Удм
ФИЦ УрО РАН Лаборатория лазерных методов исследований Г.М. Михеев.

Федотова И.В., Крылов П.Н.

Ф34 Оптические свойства материалов : учеб.-метод. пособие. – Ижевск :
Удмуртский университет, 2025. – 72 с. – Текст : электронный.

В учебно-методическом пособии представлена краткая теория оптических свойств твердых тел и методы определения оптических характеристик тонких пленок.

Пособие предназначено для бакалавров, магистрантов и аспирантов, обучающихся по направлениям обучения «Физика», «Физика конденсированного состояния вещества».

УДК 538.958(075.8)
ББК 22.374р30

© Федотова И.В., Крылов П.Н., 2025
© ФГБОУ ВО «Удмуртский
государственный университет», 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1. ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН.....	5
1.1. Оптический диапазон электромагнитных волн	5
1.2. Уравнения Максвелла.....	8
1.3. Распространение света через границы различных сред.....	15
2. КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ ТЕЛ	17
2.1. Оптические свойства металлов.....	19
2.2. Оптические свойства диэлектриков	21
2.3. Поглощение света в полупроводниках	22
3. ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА	33
3.1. Спектры электронных возбуждений	34
3.2. Колебательные спектры.....	34
3.3. Вращательные спектры	35
4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК.....	36
4.1. Методы измерения коэффициентов преломления.....	36
4.2. Определение коэффициента преломления пленок по спектрам про- пускания (метод огибающих)	38
4.2.1. Процедура вычислений.....	44
4.3. Определение коэффициента преломления пленок по спектрам отра- жения (метод огибающих).....	46
4.4. Ограничения методов «огибающих»	48
4.5. Возможности использования спектральных измерений для опреде- ления характеристик толстых пленок в отсутствие интерференции	49
4.6. Возможности использования спектральных измерений для опреде- ления характеристик тонких прозрачных пленок в отсутствие интерфе- ренции.....	49
4.7. Проверка правильности вычислений коэффициента преломления.....	50
4.8. Определение ширины запрещенной зоны	54
5. ЗАДАНИЯ И КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ	66
СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.....	69

ВВЕДЕНИЕ

Оптические свойства твердых тел весьма разнообразны. Исследования данных свойств способствуют глубокому пониманию фундаментальных и прикладных свойств различных материалов.

При изучении оптических свойств материалов студентам необходимо иметь базовые знания по таким дисциплинам, как «Физика твердого тела», «электродинамика», «Оптика»

В пособии содержатся краткие сведения об основных свойствах электромагнитных волн, а также об оптических свойствах металлов, полупроводников и диэлектриков. Изучение оптических методов анализа материалов позволят студенту самостоятельно выбрать метод исследования.

При выполнении заданий по определению оптических характеристик тонких пленок у студентов формируются умения и навыки использования на практике полученных знаний для исследовательских и проектных работ.

В ходе выполнения заданий студент должен:

- *знать*: основные закономерности взаимодействия оптического излучения с твердым телом;
- *уметь*: выбирать, адаптировать и модифицировать модели, описывающие оптические характеристики твердых тел, и рассчитывать характеристики;
- *владеть*: навыками выбора метода исследования, обобщения и интерпретации результатов исследования.

1. ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН

1.1. Оптический диапазон электромагнитных волн

Теоретически существование электромагнитных волн было предсказано Максвеллом как прямое следствие из уравнений электромагнитного поля. Скорость электромагнитных волн в вакууме оказалась равной величине $\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}$. Эта величина называется электродинамической постоянной.

$$\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}c \approx 3,1 \times 10^8 \text{ м/с.}$$

Электродинамическая постоянная совпадает со скоростью света в вакууме. Другое важное свойство электромагнитных волн и света обусловлено поперечностью волн. Эти два факта привели Максвелла к заключению, что свет представляет собой электромагнитные волны.

Электромагнитной волной называется процесс распространения переменного электромагнитного поля в свободном пространстве с конечной скоростью (скоростью света). Физические причины существования электромагнитного поля связаны с тем, что изменяющееся во времени электрическое поле \vec{E} порождает магнитное поле \vec{H} , а изменяющееся \vec{H} – вихревое электрическое поле: обе компоненты \vec{E} и \vec{H} , непрерывно изменяясь, возбуждают друг друга.

Экспериментально существование электромагнитных волн было доказано еще в 1888 году Г.Р. Герцем. Длина волн, генерированных и детектированных, составляла примерно 66 см. С помощью металлического зеркала Герц наблюдал отражение и преломление волн, изучил их поляризацию, получил стоячие волны, доказав тем самым их способность к интерференции.

В соответствии с длинами волн весь **спектр электромагнитного** излучения условно делится на ряд частично перекрывающихся областей – от радиоволн на его длинноволновой границе до гамма-лучей на границе коротких волн (рис. 1).

Видимый диапазон и примыкающие к нему диапазоны ультрафиолетового и инфракрасного излучений в совокупности составляют диапазон электромагнитных волн, изучаемый в оптике.

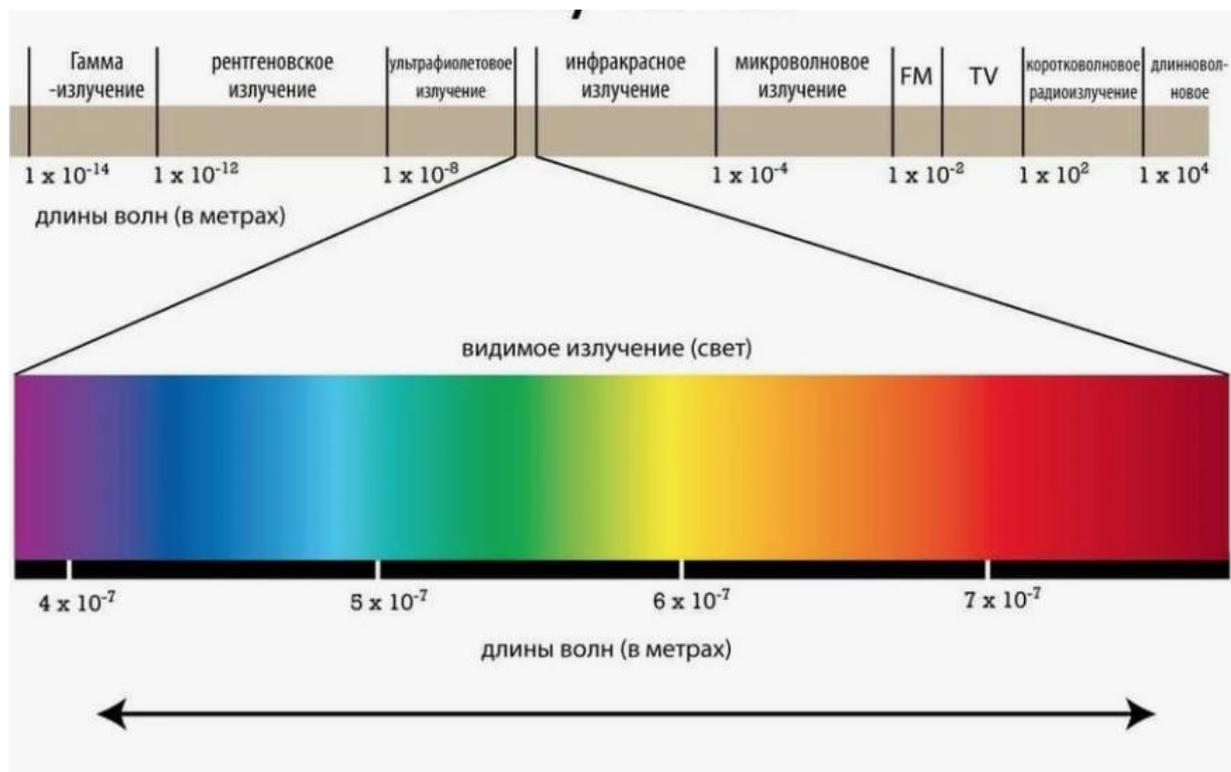


Рис. 1. Спектр электромагнитного излучения

Кванты излучения видимого диапазона называются фотонами. Они имеют энергию в интервале: $E = (2,6 \div 5,2) \cdot 10^{-19}$ Дж = $1,6 \div 3,2$ эВ.,

В основе взаимодействия электромагнитного поля с веществом лежат уравнения электродинамики. Иначе, электродинамикой принято называть раздел физики, в котором изучаются свойства электромагнитного поля и особенности его взаимодействия с веществом. Различают классическую и квантовую электродинамику. Классическая электродинамика служит теоретической базой для различных задач оптики и изучения оптических свойств веществ. Законы распространения электромагнитных полей задаются уравнениями Максвелла, в которых свойства среды учитываются введением соответствующих физических констант, а переход электромагнитных полей из одной среды в другую определяется с помощью граничных условий для векторов напряжённости электрического и магнитного полей.

В таблице 1 представлены частотные диапазоны электромагнитного излучения и соответствующие им процессы поглощения.

По физической природе возбуждаемых систем и соответствующих им оптических переходов спектры поглощения делятся на три типа: спектры электронных возбуждений, колебательные спектры и вращательные спектры.

**Частотные диапазоны электромагнитного излучения
и соответствующие им процессы поглощения**

Название диапазона	Длина волны	Процессы поглощения
1	2	4
Радиоволны	100км – 1 м	Миграционные потери (нерезонанское смещение ионов)
СВЧ	2 мм – 1 м	«Хвосты» поглощения, обусловленные колебательными переходами
ИК (инфракрасное)	760 нм – 2 мм	Фундпментальные, многофононные и примесные колебательные переходы; некоторые переходы в d- и f- оболочках ионов соответствующих элементов; поглощение на свободных носителях заряда
Оптическое излучение	Видимое 380–780 нм Ультрафиолетовое 10 – 380 нм	«Хвосты» поглощения, обусловленные фундаментальными электронными и многофотонными колебательными переходами; электронные переходы в d- и f- оболочках ионов соответствующих элементов; Фундаментальные электронные переходы; электронные переходы в d- и f- оболочках ионов соответствующих элементов
Жесткое излучение	Рентгеновское 10 – 10 ⁻² нм; Гамма 10 ⁻¹ – 10 ⁻⁶ нм	Электронные переходы в атомных остовах; внешний фотоэффект; взаимодействие с ядрами атомов

Спектры электронных возбуждений нередко называются для краткости просто электронными оптическими спектрами. Они обусловлены переходами электронов валентных оболочек атомов на возбужденные электронные уровни. Наблюдаются для всех классов веществ.

По сравнению с металлами в случае полупроводников процесс поглощения более сложен. В полупроводниках при комнатной температуре имеется незначительная концентрация свободных электронов. В собственных полупроводниках поглощение определяется в основном связанными электронами. Поглощение будет значительным на частоте, для которого энергия кванта больше ширины запрещенной зоны (основная полоса поглощения). Наличие полос поглощения вблизи края основной полосы объясняется существованием экситонного механизма поглощения. Экситон – возбужденное состояние, состоящее из электрона и положительной дырки; это возбужденное состояние переходит от одной ячейки кристалла к другой. Существует две модели экситона: экситон Френкеля (радиус экситона порядка постоянной решетки) и экситон Ванье-Мотта (ра-

диус экситона больше постоянной решетки). Движение экситона не создает электрического тока (не будет наблюдаться фотопроводимость), для образования экситона необходима меньшая энергия, чем для генерации пары свободных носителей (электрона и дырки). Экситон может исчезнуть в результате термической диссоциации распадом на электрон и дырку либо отдавая свою энергию решетке. Возможно исчезновение экситона с испусканием фотона.

1.2. Уравнения Максвелла

Д.К. Максвелл в 1860–1865 гг. обобщил все известные к тому времени экспериментальные законы электромагнетизма (законы Кулона, Био-Савара-Лапласа, Ампера, Фарадея). На их основе он сформулировал четыре закона. Этим законам должно подчиняться электромагнитное поле, обеспечивающее взаимодействие зарядов и токов. В своем знаменитом «Трактате об электричестве и магнетизме» (опубликован в 1873 году) Максвелл выделил 12 уравнений. Уравнения Максвелла для электромагнитных явлений аналогичны по своей значимости законам Ньютона в классической динамике.

Современная форма уравнений теории электромагнитного поля появилась около 1884 года после работ Хевисайда, Герца и Гиббса. Они не только переписали систему Максвелла в векторном виде, сократив число уравнений до четырех, но и симметризовали её, переформулировав в терминах поля: **напряжённости электрического поля \vec{E} , напряжённости магнитного поля \vec{H} , векторов электрической индукции \vec{D} и магнитной индукции \vec{B}** . В настоящее время эти уравнения принято называть уравнениями Максвелла.

В зависимости от выбора системы единиц в уравнениях Максвелла возникают различные коэффициенты. Международная система единиц (СИ) является стандартом в технике и преподавании, а преимущество симметричной гауссовой системы единиц (СГС) состоит в том, что все поля в ней имеют одну размерность и уравнения записываются проще. Поэтому СГС продолжает применяться в научных публикациях по электродинамике наравне с СИ.

Наиболее удобная запись уравнений в виде:

$$\operatorname{rot}\vec{H} = a\vec{j} + \beta \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

$$\operatorname{rot}\vec{E} = -\beta \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\operatorname{div}\vec{B} = 0$$

$$\operatorname{div}\vec{D} = \gamma\rho$$

Здесь константы a, β, γ связаны уравнением $a = \beta \gamma$

В уравнения можно ввести проницаемости вакуума ϵ_0 и μ_0 и относительные проницаемости среды $\epsilon_r = \epsilon/\epsilon_0$, $\mu_r = \mu/\mu_0$. Соотношение между константами принимает вид $\epsilon_0 \mu_0 c^2 \beta^2 = 1$, где c – скорость распространения света в вакууме. В гауссовой системе $\beta = 1/c$, $\alpha = 4\pi/c$, $\gamma = 4\pi$, $\epsilon_0 = \mu_0 = 1$.

При классическом подходе в системе СИ электромагнитное поле в среде описывается уравнениями Максвелла в следующем виде:

$$\text{rot} \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \quad (1.1)$$

$$\text{rot} \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (1.2)$$

$$\text{div} \vec{D} = \rho_e \quad (1.3)$$

$$\text{div} \vec{B} = 0 \quad (1.4)$$

Первое уравнение Максвелла является *обобщенным законом электромагнитной индукции*: с переменным магнитным полем неразрывно связано вихревое индуцируемое электрическое поле.

Второе уравнение - это *обобщенный закон полного тока*: магнитное поле создается как токами проводимости (направленным движением зарядов, \vec{J} – плотность тока), так и токами смещения (переменным электрическим полем). Появление тока смещения весьма важно, так как именно ток смещения обеспечивает возможность генерации и распространения электромагнитных волн.

Третье и четвертое уравнения Максвелла – это обобщение теоремы Гаусса для электрического и магнитного полей. Теорема Гаусса указывает на источники полей (ρ_e - объемная плотность зарядов).

Электрическая индукция \vec{D} и напряженность магнитного поля \vec{H} определяются равенствами:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}_d \quad (1.5)$$

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M} \quad (1.6)$$

\vec{P}_d – электрическая поляризация (средний электрический дипольный момент единицы объема), \vec{M} – намагниченность (средний магнитный дипольный момент единицы объема). Квадрупольные и более высокие моменты пренебрежимо малы по сравнению с дипольным моментом.

Уравнения Максвелла чаще всего дополняют «материальными» уравнениями, учитывающими макроскопические характеристики среды: электропроводность σ , магнитную проницаемость μ и электрическую восприимчивость χ . При отсутствии ферромагнитных и сегнетоэлектрических материалов для линейных изотропных сред материальные уравнения имеют вид:

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}, \quad \vec{B} = \mu \mu_0 \vec{H}, \quad \vec{D} = \epsilon \epsilon_0 \vec{E} \quad \vec{P}_d = \epsilon_0 \chi \vec{E} \quad (1.7)$$

$\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{Ф/м}$, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{Гн/м}$ – диэлектрическая и магнитные постоянные соответственно. Выражения (1.7) определяют диэлектрическую ε , магнитную μ проницаемости и удельную проводимость σ среды, которые в общем случае являются тензорными величинами. Рассмотренные уравнения связывают средние макроскопические характеристики среды (то есть усредненные по физически малому объему, содержащему большое число атомов). Если напряженностям полей \vec{E} и \vec{H} линейные, материальные уравнения (1.7) описывают так называемые **линейные оптические среды**. Все это справедливо для напряженностей электрического и магнитного полей существенно меньших их внутриатомных значений.

Уравнения (1.1)–(1.7) справедливы во всех внутренних точках среды, но они теряют смысл на границах раздела, где параметры среды и, следовательно, электромагнитного поля, меняются скачками. Для расчета полей в кусочно-непрерывных средах (воздух – металл, диэлектрик – металл, диэлектрик – воздух и т. д.) необходимо учитывать граничные условия, устанавливающие связи между векторами поля с разных сторон от границы раздела сред. Условия на границе раздела могут быть получены на основании интегральных уравнений Максвелла. На границе раздела двух диэлектриков равны касательные составляющие напряженности электрического поля (рис. 2).

На границе раздела двух диэлектриков равны касательные составляющие напряженности электрического поля

$$E_{1\tau} = E_{2\tau} \quad (1.8)$$

Нормальные составляющие вектора \vec{D} претерпевают скачок, равный поверхностной плотности свободных зарядов σ_{eS} в заданной точке границы

$$D_{2n} - D_{1n} = \sigma_{eS} . \quad (1.9)$$

При расчете электромагнитных полей в проводящих средах ($\sigma_e \neq 0$) на границе раздела выполняются граничные условия для векторов \vec{E} и плотности тока \vec{j}

$$E_{1\tau} = E_{2\tau} , \quad j_{1n} = j_{2n} \quad (1.10)$$

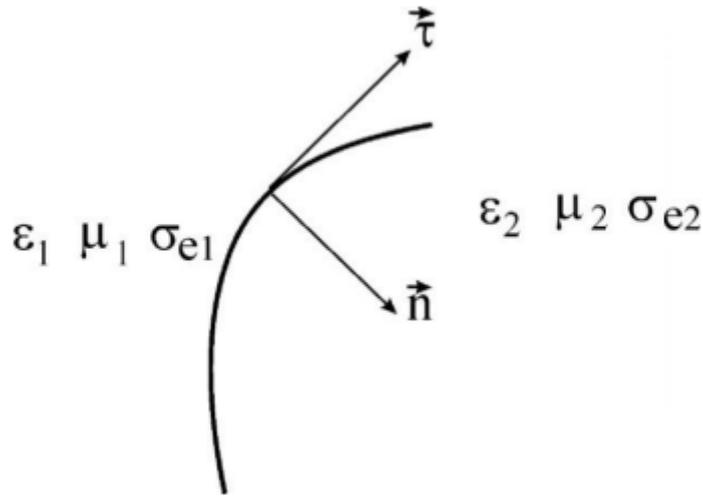


Рис. 2. Выбор направляющих векторов $\vec{\tau}$, \vec{n} для граничных условий

При анализе несовершенных диэлектриков, когда требуется учитывать не только их диэлектрические свойства, но и конечную проводимость, должны выполняться все указанные выше условия. На основании (1.9) и (1.10) с учетом того, что

$$\vec{j} = \sigma_e \vec{E},$$

получают условие

$$\sigma_{es} = j_n \left(\frac{\varepsilon_2}{\sigma_{e2}} - \frac{\varepsilon_1}{\sigma_{e1}} \right) \quad (1.11)$$

Условие (1.11) показывает, что в этом случае на границе раздела появляются поверхностные заряды, плотность которых определяется нормальной составляющей плотности тока проводимости и параметрами сред.

На границе раздела сред с различными магнитными свойствами равны нормальные составляющие вектора магнитной индукции:

$$B_{1n} = B_{2n} \quad (1.12)$$

а разность касательных составляющих напряженностей магнитных полей равна плотности поверхностного тока j_s :

$$H_{2\tau} = H_{1\tau} = j_s \quad (1.13)$$

Условия (1.8) – (1.13) справедливы и для статических, стационарных электромагнитных полей и для переменных во времени.

Векторные поля $\vec{E}(r,t)$ и $\vec{H}(r,t)$ могут быть найдены путем решения уравнений (1.1) – (1.7). Система уравнений Максвелла имеет единственное решение, т. е. дает однозначное предсказание хода рассматриваемого электромагнитного процесса, если это решение определено с помощью начальных и граничных

условий. Граничные условия (1.8) ÷ (1.13) задают поля $\vec{E}(r,t)$ и $\vec{H}(r,t)$ в любой момент времени на поверхностях раздела.

Система уравнений (1.1) ÷ (1.7) является системой дифференциальных уравнений в частных производных, записанных на языке векторного анализа.

Для линейной однородной изотропной среды электрическая восприимчивость χ является мерой того, насколько легко поляризуется вещество, она характеризует отклик вещества на поле \vec{E} . Коэффициенты макроскопической теории σ , μ и χ зависят от свойств рассматриваемой среды, но если среда линейна, однородна и изотропна то они не зависят от полей, но считается, что они зависят от частоты ω . Предполагается, что величины векторов поля конечны по всему объему вещества вместе со своими первыми производными. Исключениями являются точки, лежащие на границах раздела сред с различными значениями комплексных параметров: относительной диэлектрической проницаемостью ϵ_r , относительной магнитной проницаемостью μ_r и удельной электропроводностью σ . Материальные уравнения можно также записать в виде:

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}, \quad \vec{B} = \mu \vec{H}, \quad \vec{J} = \sigma \vec{E}, \quad (1.14)$$

$$\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r, \quad \mu = \mu_0 \mu_r.$$

Для сред с постоянными значениями ϵ , μ и σ уравнения (1.1) ÷ (1.7) линейны. Поэтому они легко могут быть сведены к одному векторному дифференциальному уравнению для любого из векторов поля. Можно ограничиться построением уравнений только для векторов \vec{E} и \vec{H} . А после определения этих векторов по материальным уравнениям (1.14) можно найти и другие вектора.

Система уравнений Максвелла допускает распространение в среде поперечной электромагнитной волны. Для вектора напряженности электрического поля можно записать:

$$\text{rot}(\text{rot} \vec{E}) = \text{rot} \left(-\mu \mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \right) = \mu \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \text{rot} \vec{H} = -\mu \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(\epsilon \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \sigma \vec{E} \right) \quad (1.15)$$

Воспользуемся тождеством

$$\text{rot}(\text{rot} \vec{E}) = \text{grad} \text{div} \vec{E} - \text{div} \text{grad} \vec{E} = \text{grad} \text{div} \vec{E} - \Delta \vec{E} \quad (1.16)$$

Если отсутствуют объемные заряды, то

$$\text{grad} \text{div} \vec{E} = 0$$

Тогда

$$\text{rot}(\text{rot} \vec{E}) = -\Delta \vec{E}$$

Из выражений (1.15) и (1.16) следует волновое уравнение, описывающее распространение плоской волны вдоль оси z:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial z^2} = \mu_0 \epsilon_0 \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} + \mu_0 \mu \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.17)$$

Одним из его решений является плоская волна вида

$$\vec{E}(z, t) = \vec{E}_0 \exp(-i(\omega t - kz)) \quad (1.18)$$

ω - циклическая частота, k - волновое число, \vec{E}_0 - амплитуда световой волны.

Подставляя (1.18) в (1.17), получаем, что

$$-k^2 = -\omega^2 \mu_0 \varepsilon_0 \mu \varepsilon - i\omega \mu_0 \mu \sigma \quad (1.19)$$

Квадрат волнового числа и само волновое число являются комплексными величинами.

Известно, что

$$\mu_0 \varepsilon_0 = \frac{1}{c^2}$$

c – скорость света в вакууме
отсюда

$$\widehat{k^2} = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon + i\omega \mu_0 \sigma = \frac{\omega^2}{c^2} \left(\varepsilon + i \frac{\mu_0 \sigma}{\omega} \right) = \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\varepsilon} \quad (1.20)$$

В последнем выражении введена комплексная диэлектрическая проницаемость $\hat{\varepsilon}$. Комплексную диэлектрическую проницаемость можно представить через ее действительную ε_r и мнимую ε_i части:

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon_r + i\varepsilon_i \quad (1.21)$$

Вместо комплексной диэлектрической проницаемости среду можно охарактеризовать комплексным показателем преломления

$$\hat{n} = \sqrt{\hat{\varepsilon}} \quad (1.22)$$

$$\hat{n} = n + ik \quad (1.23)$$

n – показатель преломления, k – показатель поглощения или коэффициент экстинкции (показатель затухания).

Можно получить

$$\hat{\varepsilon} = \hat{n}^2 = (n + ik)^2 = n^2 - k^2 + i2nk \quad (1.24)$$

$$\varepsilon_r = n^2 - k^2 \quad (1.25)$$

$$\varepsilon_i = 2nk \quad (1.26)$$

Можно также выразить показатель преломления и показатель поглощения через мнимую и действительную части диэлектрической проницаемости. Если подставим выражение (1.26) в (1.25), получим

$$\varepsilon_r = n^2 - \left(\frac{\varepsilon_i}{2n} \right)^2 \quad (1.27)$$

откуда

$$n^4 - \varepsilon_r n^2 - \frac{\varepsilon_i^2}{4} = 0 \quad (1.28)$$

Решая его, получим

$$n^2 = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_r + \sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2} \right) \quad (1.29)$$

Затем можно получить

$$k^2 = \frac{1}{2} \left(-\varepsilon_r + \sqrt{\varepsilon_r^2 + \varepsilon_i^2} \right) \quad (1.30)$$

$$\hat{k} = \frac{\omega}{c} \hat{n} = \frac{\omega}{c} (n + ik) \quad (1.31)$$

Напряженность электрического поля электромагнитной волны в среде будет иметь вид

$$\vec{E}(z, t) = \vec{E}_0 \exp \left(-i\omega \left(t - \frac{\hat{n}}{c} z \right) \right) = \vec{E}_0 \exp \left(-i\omega \left(t - \frac{n}{c} z \right) \right) \exp \left(-\frac{\omega k}{c} z \right) \quad (1.32)$$

Если перейти от напряженности электрического поля электромагнитной волны к интенсивности I (плотность потока энергии электромагнитной волны, усредненного по времени, много большему периоду колебаний), то можно получить закон Бугера-Ламбера-Бера:

$$I = I_0 \exp \left(-\frac{2\omega k}{c} z \right) = I_0 \exp(-\alpha z) \quad (1.33)$$

α – коэффициент поглощения

$$\alpha = \frac{2\omega k}{c} = \frac{4\pi k}{\lambda_0} \quad (1.34)$$

λ_0 – длина световой волны в вакууме

Если рассматривать выражение (31), то $t - \frac{n}{c} z$ можно преобразовать к виду $t - \frac{z}{c/n}$, величина c/n – это фазовая скорость волны. Из этого выражения следует, что показатель преломления отвечает за фазовую скорость, а показатель поглощения отвечает за затухание световой волны в среде.

Величины n и k часто называют оптическими характеристиками. Данные величины зависят от длины волны (частоты) электромагнитного излучения, (являются спектральными характеристиками среды).

Взаимодействие электромагнитного излучения с однородной средой характеризуют величины $\hat{\varepsilon}$, \hat{k} , \hat{n} , α , k .

1.3. Распространение света через границы различных сред

При исследовании распространения света через границы различных сред рассматривают амплитудные коэффициенты отражения (r) и преломления (t), т. е. отношения амплитуды напряженности электрического поля отраженной и преломленной волны к амплитуде напряженности электрического поля падающей волны соответственно.

Рассматривают два случая:

1. Вектор напряженности электрического поля падающей волны перпендикулярен плоскости падения (s- поляризация).
2. Вектор напряженности электрического поля падающей волны параллелен плоскости падения (p- поляризация).

На рис. 3 представлено отражение и преломление световой волны на границе двух однородных сред 1 и 2 с показателями преломления \hat{n}_1 и \hat{n}_2 .

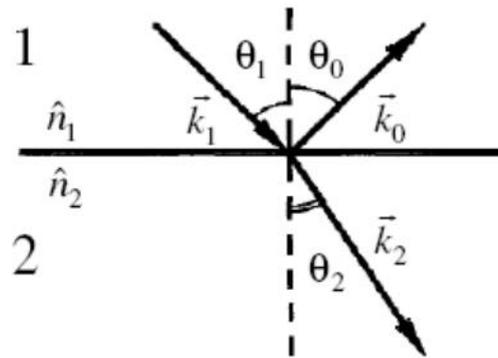


Рис. 3. Отражение и преломление световой волны на границе двух однородных сред 1 и 2 с показателями преломления \hat{n}_1 и \hat{n}_2

Используя уравнения Максвелла и граничные условия, для амплитудных коэффициентов (коэффициентов Френеля) записывают выражения (формулы Френеля):

$$r_s = \frac{\hat{n}_1 \cos \theta_1 - \hat{n}_2 \cos \theta_2}{\hat{n}_1 \cos \theta_1 + \hat{n}_2 \cos \theta_2} \quad (1.35)$$

$$r_p = \frac{\hat{n}_2 \cos \theta_1 - \hat{n}_1 \cos \theta_2}{\hat{n}_2 \cos \theta_1 + \hat{n}_1 \cos \theta_2} \quad (1.36)$$

$$t_s = \frac{2\hat{n}_1 \cos \theta_1}{\hat{n}_1 \cos \theta_1 + \hat{n}_2 \cos \theta_2} \quad (1.37)$$

$$t_p = \frac{2\hat{n}_1 \cos \theta_1}{\hat{n}_2 \cos \theta_1 + \hat{n}_1 \cos \theta_2} \quad (1.38)$$

θ_1 – угол падения, θ_2 – угол преломления, \widehat{n}_1 и \widehat{n}_2 – комплексные показатели преломления сред.

Используя закон преломления света и тригонометрические тождества, можно получить другой вид выражений для амплитудных коэффициентов:

$$r_s = -\frac{\sin(\theta_1 - \theta_2)}{\sin(\theta_1 + \theta_2)} \quad (1.39)$$

$$r_p = \frac{\operatorname{tg}(\theta_1 - \theta_2)}{\operatorname{tg}(\theta_1 + \theta_2)} \quad (1.40)$$

$$t_s = \frac{2\sin\theta_2\cos\theta_1}{\sin(\theta_1 + \theta_2)} \quad (1.41)$$

$$t_p = \frac{2\sin\theta_2\cos\theta_1}{\sin(\theta_1 - \theta_2)\cos(\theta_1 - \theta_2)} \quad (1.42)$$

Распространение энергии при наличии границы раздела сред характеризуется энергетическими коэффициентами отражения R и пропускания T :

$$R = [r]^2 = \frac{I_r}{I_i} \quad (1.43)$$

I_i – интенсивность падающей волны, I_r – интенсивность отраженной волны.

В случае нормального падения излучения из среды 1 на границу раздела со средой 2 энергетический коэффициент отражения становится одинаковым для обеих поляризаций падающего излучения:

$$R = \left[\frac{(\widehat{n}_1 - \widehat{n}_2)}{(\widehat{n}_1 + \widehat{n}_2)} \right]^2 \quad (1.44)$$

Энергетический коэффициент отражения полубесконечной однородной изотропной проводящей среды в вакууме при нормальном падении излучения вычисляется следующим образом:

$$R = \left[\frac{(\widehat{n} - 1)}{(\widehat{n} + 1)} \right]^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (1.45)$$

Для энергетических коэффициентов пропускания нормальные компоненты выражаются через косинусы углов падения θ_1 и преломления θ_2 (интенсивность световой волны пропорциональна скорости распространения волны в среде, то есть действительной части коэффициента преломления)

$$T = \frac{I_t \cos\theta_2}{I_i \cos\theta_1} [t]^2 = \frac{n_2 \cos\theta_2}{n_1 \cos\theta_1} [t]^2 \quad (1.46)$$

I_t – интенсивность отраженной волны.

2. КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Для описания оптических свойств твердых тел в широком спектральном интервале от вакуумного ультрафиолета до дальней ИК области Лоренцом в начале XX в. была предложена теория, основанная на представлении электронов и атомов в твердом теле как совокупности гармонических осцилляторов (т. е. частиц, соединенных упругими возвращающими связями типа пружин), на которые действуют силы, обусловленные внешним переменным электрическим полем.

Твердое тело, помещенное в переменное электрическое поле световой волны, представляют в классическом приближении совокупностью N одинаковых изотропных и не взаимодействующих осцилляторов. Каждый осциллятор характеризуется массой m и зарядом e . На каждый из этих осцилляторов в данный момент времени действуют следующие силы:

- линейная возвращающая сила Kx , где K – постоянная упругости, x – смещение частицы из положения равновесия;
- тормозящая сила $b\dot{x}$ (b – постоянная затухания);
- сила электрического поля E_l .

Уравнение движения такого осциллятора (классическая механика) есть

$$m\ddot{x} + b\dot{x} + Kx = eE_0 \exp(i\omega t) \quad (2.1)$$

Решением этого уравнения является

$$x = - \frac{(e/m)E_0 \exp(i\omega t)}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega} \quad (2.2)$$

$$\gamma = b/m, \quad \omega_0^2 = K/m$$

При $\gamma \neq 0$ коэффициент пропорциональности между x и E комплексен, а это значит, что смещение частицы и изменение поля происходят не в фазе. Смещение частицы можно представить, как

$$Ae^{i\theta} (eE/m) \quad (2.3)$$

A – амплитуда движения, θ – фаза.

$$A = \frac{1}{[(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2 \omega^2]^{1/2}}, \quad \theta = \arctg \frac{\gamma\omega}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad (2.4)$$

Амплитуда максимальна при $\omega = \omega_0$, причем ее пиковая величина обратно пропорциональна γ (при условии $\gamma \ll \omega_0$). На низких частотах ($\omega \ll \omega_0$) значения $\theta \approx 0^\circ$, т. е. фаза осциллятора совпадает с фазой электрического поля, а на высоких частотах сдвинута по отношению к нему на 180° . Причем ее изменение происходит в узкой области вблизи резонансной частоты.

Суммарный дипольный момент твердого тела (совокупности из N осцилляторов) будет равен:

$$NP = Nex, \quad P = \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \varepsilon_0 E \quad (2.5)$$

$$\omega_p^2 = Ne^2/m\varepsilon_0$$

ω_p – плазменная частота.

Если считать

$$P = \varepsilon_0 \chi E,$$

$$\hat{\varepsilon} = 1 + \chi = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (2.6)$$

Отсюда

$$\varepsilon_r = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma^2\omega^2}, \quad \varepsilon_i = 1 + \frac{\omega_p^2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma^2\omega^2} \quad (2.7)$$

Из этих уравнений следует, что при $\gamma \ll \omega_0$ максимум ε_i приходится на частоту ω_0 . Взаимосвязи между величинами ε_r , ε_i и ω представлены на рис. 4.

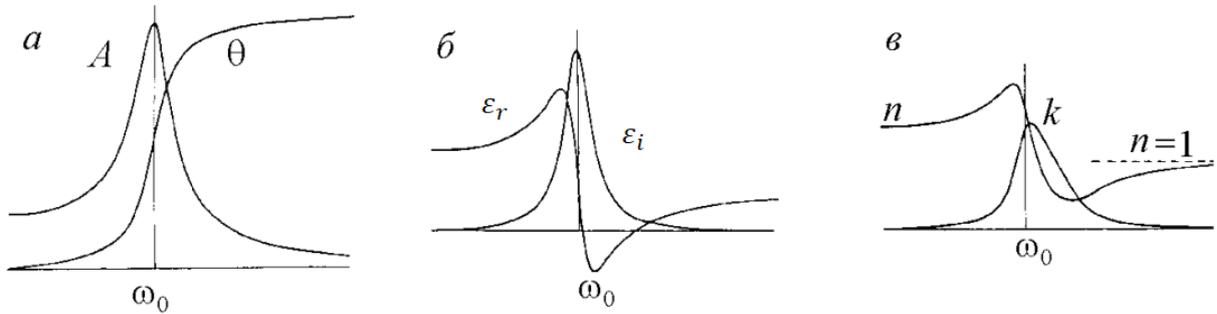


Рис. 4. Частотная зависимость амплитуды осциллятора (а), диэлектрической проницаемости (б) и оптических постоянных (в) поглощающей среды

При подходе на основе квантовой механики свет представляют в виде фотонов с энергией E . $E = \hbar\nu$, \hbar – постоянная Планка. Попадая в твердое тело фотон, может передать ему энергию и импульс в виде, например, фонона. Квантово-механическую модель диэлектрических свойств твердого тела с точки зрения физики фононов можно описать как [2]:

$$\mathcal{E}(\omega) = 1 + \sum_j \frac{(Ne^2/m)S_{ij}}{\omega_{ij}^2 - \omega^2 + i\gamma\omega} \quad (2.8)$$

При $j = 1$ данная формула совпадает с формулой (2.6), полученной на основе классической модели.

Интерпретация величин в формулах (2.6) и (2.8) различна.

В классической модели ω_0 – это частота гармонического осциллятора, а в квантово-механической ω_{ij} – это частота, деленная на разность энергетических уровней основного и возбужденного состояний.

В классической модели γ – это множитель ослабления (аналогичный затуханию при движении в вязкой жидкости), а в квантово-механической он связан с вероятностью перехода во все другие квантовые состояния.

Сила осциллятора S_{ij} представляет собой вероятность возбуждения из состояния i в состояние j и выражается через матричный элемент дипольного момента.

2.1. Оптические свойства металлов

У проводников (в частности металлов) в структуре имеется огромное число электронов и бесконечное множество энергетических состояний и уровней, которые они могут занимать. Из-за периодичности кристаллической решетки проводника энергетические состояния группируются в энергетические зоны, между которыми может быть энергетическая щель –запрещенная зона. Проводимость определяется количеством слабосвязанных электронов в структуре и числом вакантных мест при их перемещении. Если зона электронных состояний заполнена не полностью или если зона заполненных состояний энергетически перекрывается с другой свободной энергетической зоной, то будет и наибольшее число вакантных мест для перемещения свободных носителей заряда.

Большое число слабосвязанных электронов определяет взаимодействие металлов с электрическим полем световой волны. Металлы в широком диапазоне частот от видимой до дальней ИК области характеризуются высокой отражательной способностью, которая согласно микроскопической теории оптических свойств объясняется поглощением световой волны электронами проводимости с последующим ее быстрым переизлучением возбужденными волной электронами.

Уравнение движения гармонического осциллятора (2.1) (классическая механика) записывали таким образом

$$m\ddot{x} + b\dot{x} + Kx = eE_0 \exp(i\omega t)$$

Величина подвижности электронов очень высока. K (постоянную упругости) можно считать равной нулю.

Решением уравнения (2.1) было уравнение (2.2)

$$x = -\frac{(e/m)E_0 \exp(i\omega t)}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma\omega}$$

$\gamma = b/m$, $\omega_0^2 = K/m$, далее получали уравнение (2.6) и потом (2.7)

$$\hat{\varepsilon} = 1 + x = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

$$\varepsilon_r = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma^2\omega^2}, \quad \varepsilon_i = 1 + \frac{\omega_p^2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2) + \gamma^2\omega^2}$$

В металлах при $\omega_0 = 0$

$$\hat{\varepsilon} = -1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\gamma\omega} \quad (2.9)$$

$$\varepsilon_r = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \gamma^2}, \quad \varepsilon_i = \frac{\omega_p\gamma}{\omega(\gamma^2 + \omega^2)} \quad (2.10)$$

Уравнение (2.10) описывает оптические свойства металлов со слабосвязанными электронами («приближению Друде»).

Если слабосвязанные электроны вывести из состояния равновесия, то внутри металла возникнет неравномерное распределение электронной плотности и локальное электрическое поле, которое будет стремиться восстановить нейтральность заряда. Электроны по инерции будут проходить положение равновесия, в результате чего возникнет колебание электронной плотности с частотой $\omega_p = Ne^2/(m\varepsilon_0)$, где N – концентрация свободных электронов. При $\omega = \omega_p$ диэлектрическая проницаемость Друде обращается в нуль.

Колебания электронной плотности при этой частоте можно представить, как «продольные» коллективные колебания электронного газа, возникающие за счет действия дальнедействующих кулоновских сил. Такие колебания называют плазменными. На квантово-механическом языке в данном случае говорят о возбуждении плазменных колебаний и рождении плазмона.

Одним из условий существования плазмона является $\tau > 2/\gamma$ (τ – время жизни плазмона). Для большинства металлов это условие выполняется. Так как $\gamma \ll \omega_p$, поэтому хорошим приближением является

$$\varepsilon_r \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad \varepsilon_i \approx \frac{\omega_p\gamma}{\omega^2} \quad (2.11)$$

На высоких частотах при $\omega_p < \omega$ металлы ведут себя аналогично полупроводникам и диэлектрикам, и основной вклад в спектр вносят только межзонные переходы.

На частотах $\omega = \omega_p$ $\varepsilon_i = 1$ и $\varepsilon_r = 0$, откуда следует, что на этих частотах металлы должны быть прозрачны.

Однако при $\omega < \omega_p$ ε_r велико и отрицательно, ε_i тоже велико и их значения монотонно изменяются с уменьшением частоты. На этих частотах из-за малых значений n и больших значений k коэффициент отражения от металла принимает значения близкие к 100 %.

Модель Друде может быть применена не только к металлам, но и к легированным полупроводникам.

Однако данная модель не дает хороших результатов при рассмотрении оптических свойств ряда металлов, в частности Ag и Cu, при частотах, превышающих ω_p . Для них вопреки предсказаниям теории в высокочастотной области наблюдаются сравнительно интенсивные полосы отражения. С позиций классической теории оптических свойств указанный эффект может быть объяснен с точки зрения представлений не свободных, а «связанных» электронов.

2.2. Оптические свойства диэлектриков

Диэлектрики не имеют электронов проводимости и, как правило, прозрачны в видимой и ближней ИК области спектра. В средней и дальней ИК областях спектра можно выделить множество полос поглощения, которые относятся не к электронным, как в случае полупроводников и металлов, осцилляторам, а к ионным, также описываемым на основе модели классического осциллятора Лоренца.

В формуле (2.6) вместо 1 следует использовать значение диэлектрической проницаемости на частотах меньших, чем частоты электронных возбуждений.

$$\hat{\varepsilon} = 1 + x = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

Как правило, в качестве такой величины берут значение диэлектрической проницаемости в видимой области спектра ε_∞

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_t^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (2.12)$$

В (2.12) также заменяется ω_0 на ω_t – частоту поперечной оптической моды в кристалле диэлектрика, а через ω_p обозначается величина $Ne^2/(m\varepsilon_0)$ (плазменная частота ионных осцилляторов в решетке, а не электронных). Масса электрона в тысячи раз меньше массы ионов, частота будет в тысячи раз меньше, чем плазменная частота электронов в металле.

В литературе в качестве примера, который хорошо описывается одноосцилляторной моделью, рассмотрен спектр отражения кристалла NaCl. Данный кристалл имеет кристаллическую решетку кубической симметрии. Спектр характеризуется интенсивной полосой отражения в области аномальной дисперсии оптических постоянных (рис. 5)

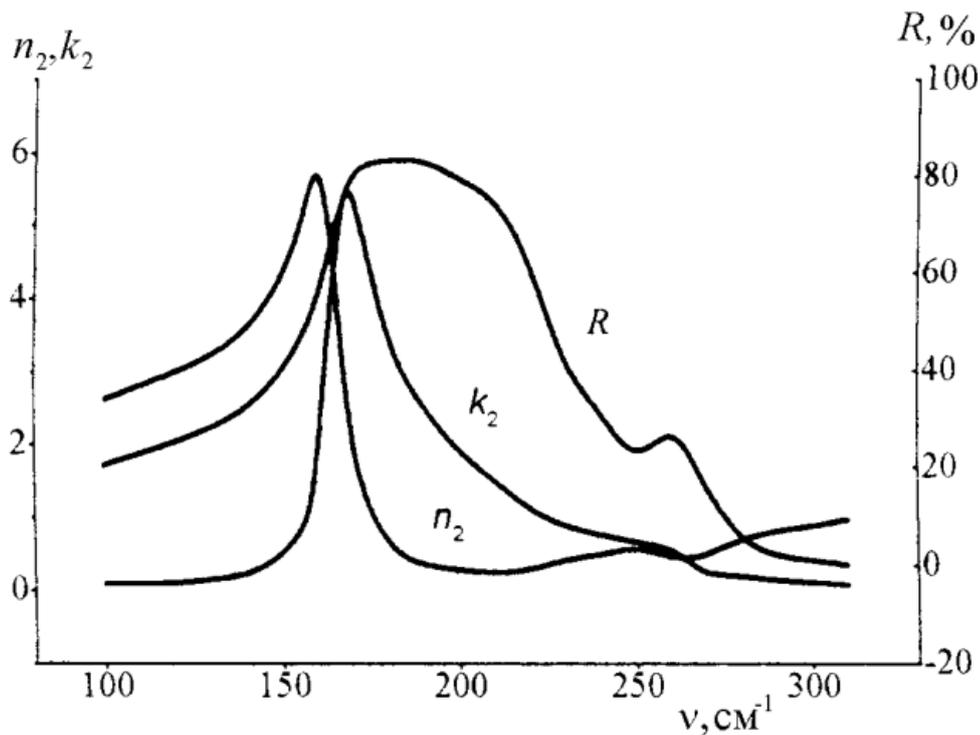


Рис. 5. Расчетный ИК спектр отражения кристалла NaCl, вычисленный при $\varphi = 10^\circ$ для значений n_2 и k_2 , взятых из справочника

2.3. Поглощение света в полупроводниках

В собственных полупроводниках (не содержащий примесей), имеющих при комнатной температуре незначительную концентрацию свободных электронов, поглощение света определяется, в основном, связанными электронами. Поглощение фотонов с достаточно большой энергией сопровождается переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости. Сильно поглощать излучение на частоте ω будут лишь те полупроводники, для которых энергия кванта $\hbar\omega$ больше ширины запрещенной зоны E_g . Свет с частотой меньше ширины запрещенной зоны проходит сквозь собственный полупроводник, не вызывая фотоионизации. У всех полупроводников существует широкая спектральная область интенсивного поглощения, ограниченная со стороны длинных волн резким краем. Возрастание коэффициента поглощения для фотонов с энергиями $\hbar\omega > E_g$, позволяет оценить значение ширины запрещенной зоны.

Вблизи края основной полосы имеются полосы селективного поглощения, которые объясняют существованием экситонного механизма поглощения света. Экситон можно представить себе, как возбужденное состояние, переходящее от одной ячейки кристалла к другой, или как систему, состоящую из электрона и положительной дырки, напоминающую атом водорода. Представление о возбужденных состояниях электронной системы кристалла, не связанных с локали-

зованными центрами, было выдвинуто Я.И. Френкелем, предложившим для обозначения таких состояний термин «экситон». Поглощение света в дополнительной полосе не сопровождается возникновением фотопроводимости. Движение экситона в кристалле не создает электрического тока. Для образования экситона необходима меньшая энергия, чем для генерации пары свободных носителей – электрона и дырки. Экситон может окончить свое существование либо в результате термической диссоциации, сопровождающейся возникновением электрона и дырки, либо отдавая свою энергию решетке. Возможно также исчезновение экситона с испусканием фотона. Этот процесс является своеобразным случаем излучательной рекомбинации неравновесных носителей.

В полупроводниках наблюдается неселективное поглощение свободными электронами. Это поглощение наблюдается в широкой длинноволновой области спектра ($\hbar\omega < E_g$), обусловлено переходами электронов внутри одной зоны, например, зоны проводимости (часто это поглощение не совсем точно называют «поглощением свободными носителями»). Коэффициент поглощения в этом случае приблизительно пропорционален концентрации свободных носителей. Вследствие экспоненциальной зависимости количества электронов проводимости от температуры поглощение этого типа резко возрастает при увеличении температуры

В отличие от поглощения, характеризуемого монотонным возрастанием α с длиной волны, возможно иногда существование сравнительно узких спектральных полос поглощения, также связанных с взаимодействием излучения с носителями тока. Наиболее изученным случаем селективного поглощения носителями тока является поглощение дырками в кристаллах Ge. Было установлено, что в области за краем основной полосы поглощения, вблизи 3,4 мкм и 4,7 мкм, а также при длинах волн, превышающих 10 мкм, имеют место полосы поглощения, интенсивность которого пропорциональна концентрации дырок. В структуре валентных зон, в кристаллах Si селективного поглощения дырками практически не наблюдается.

При достаточно низких температурах электроны из зоны проводимости вымораживаются на примесные центры. По величине энергии ионизации примесные состояния условно разделяют на «глубокие» и «мелкие». Обычно поглощение на примесях проявляется в виде широкого непрерывного спектра, простирающегося до края основной полосы поглощения. Охлаждая полупроводник до температуры жидкого гелия, спектр поглощения можно сузить в отдельные линии. Глубокими уровнями обычно называют те уровни, вероятность термической ионизации которых при комнатной температуре мала. Существование примесных центров или дефектов структуры с глубокими уровнями часто определяет такие основные физические характеристики полупроводника, как

скорость рекомбинации неравновесных носителей, спектральную область фотопроводимости, а также спектр люминесценции. Энергию ионизации большинства глубоких примесных уровней определяют путем электрических измерений или по спектральной зависимости примесной фотопроводимости (обычно в ИК области) а не по данным оптического поглощения.

В полупроводниках возможно поглощение света при возбуждении колебаний кристаллической решетки, при этом поглощение света не сопровождается фотоионизацией. Этот тип поглощения характерен для ионных кристаллов. Эти кристаллы имеют (обычно в далекой ИК-области), полосу интенсивного поглощения и несколько смещенный относительно нее максимум отражательной способности.

Интенсивность полос поглощения света при возбуждении колебаний кристаллической решетки не зависит от типа и концентрации электрически активных примесей. Показано, что интенсивность поглощения в этих полосах пропорциональна среднему квадратичному смещению атомов при тепловом возбуждении. Для объяснения причины существования полос поглощения полагают, что тепловое движение атомов (или наличие структурных дефектов) деформирует распределение заряда в кристалле, создавая электрические диполи, с которыми может взаимодействовать падающее ИК-излучение.

Электронные переходы, происходящие в полупроводниках и связанные с появлением свободных носителей заряда, представлены на рис. 6. Электронные переходы, приводящие к возникновению экситонов или возбужденных примесных центров, а также внутризонные переходы не сопровождаются появлением свободных носителей заряда. Данные переходы на рис. 6 не представлены.

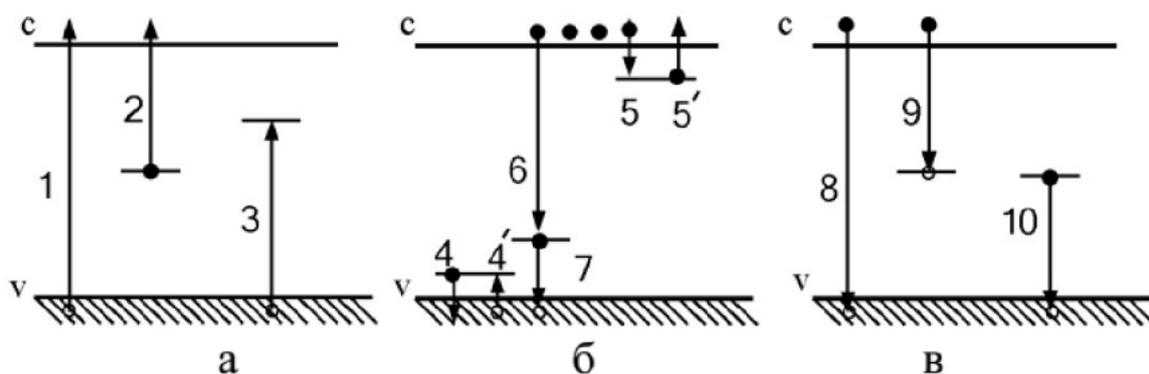


Рис. 6. Электронные переходы в полупроводнике с локальными центрами:
а – фотоионизация, б – захват носителей, в – рекомбинация

Переходы 1, 2 и 3 (рис. 5а) соответствуют поглощению света: в основной полосе – 1 и локализованными примесями – 2, 3. В случае 1 возникает пара сво-

бодных носителей, в случае 2 – свободный электрон и связанная (локализованная) дырка, в случае 3 – свободная дырка и связанный электрон. Переходы 4 и 4' и 5 и 5' на рис. 5 б соответствуют захвату и термическому освобождению носителей; переход 6 – захвату электрона рекомбинационным центром, а электронный переход 7 – захвату дырки. Переход 8 – рекомбинация свободного электрона со свободной дыркой. Переходы этого типа обычно являются излучательными, т. е. освобождающаяся энергия излучается в виде фотона с энергией, примерно равной ширине запрещенной зоны. Вероятность непосредственной рекомбинации обычно очень мала и не определяет средних значений времени жизни неравновесных носителей. Переход 9 – захват электрона центром, вблизи которого находится связанная с ним дырка. Переход 10 – захват дырки центром, вблизи которого локализован электрон. Эти переходы могут быть излучательными.

В результате фотоионизации возникшие неравновесные электроны и дырки существуют до тех пор, пока не будут захвачены примесными центрами. Процесс захвата примесными центрами является более вероятным, чем непосредственная рекомбинация или образование экситона. Центры, способные захватывать свободные носители (ловушки), разделяют на: центры прилипания и рекомбинационные центры. Центры прилипания считается, если захваченный носитель имеет большую вероятность обратного термического возбуждения в свободное состояние по сравнению с вероятностью рекомбинации на центре с носителем противоположного знака. В противном случае, если наиболее вероятной для захваченного носителя является рекомбинация с носителем противоположного знака, – рекомбинационный центр. Центр с энергетическим уровнем вблизи одной из зон обычно действует как центр прилипания, а центр с уровнем вблизи середины запрещенной полосы – как рекомбинационный центр. Различие между центрами прилипания и рекомбинационными центрами определяется соотношением вероятностей термического освобождения и рекомбинации.

Возвращение электронной системы кристалла из возбужденного состояния в равновесное может сопровождаться люминесценцией («рекомбинационным излучением» полупроводников). Вероятность рекомбинации в значительной мере определяется тем, каким способом преобразуется энергия возбужденных носителей. Возможны различные процессы преобразования или рассеяния энергии неравновесных носителей: испускание света (фотонов); передача энергии возбуждения кристаллической решетке (испускание фононов); передача избытка энергии двух рекомбинирующих носителей третьему носителю (процесс, обратный ударной ионизации, называемый «ударной рекомбинацией» или эффектом Оже); возможны комбинации двух процессов передачи энергии, напри-

мер, испускание фотона и одновременное возбуждение фононов. Когда возникает несколько фононов, они могут появляться либо одновременно, либо последовательно (каскадом).

Выделяют следующие механизмы поглощения света:

1) Собственное (межзонное) поглощение света ($\hbar\omega > E_g$). В этом случае один из валентных электронов становится свободным, одновременно образуется дырка (образуется электронно-дырочная пара). Процесс межзонного поглощения – это внутренний фотоэффект, при этом коэффициент поглощения составляет $\alpha \approx 10^3 - 10^5 \text{ см}^{-1}$.

2) Внутризонное поглощение (поглощение свободными носителями – электронами и дырками). Оно аналогично поглощению свободными электронами в металле, отличие лишь в концентрации свободных носителей ($n_{e,p} \sim 10^{14} - 10^{17} \text{ см}^{-3}$). Коэффициент этого поглощения $\alpha \sim n_{e,p}$, $\alpha \sim \lambda^2$.

3) Примесное поглощение – участвуют энергетические состояния в запрещенной зоне ($\hbar\omega < E_g$), $\alpha \leq 10 \text{ см}^{-1}$.

4) Решеточное (остаточное) поглощение. Оно имеет место тогда, когда свет взаимодействует непосредственно с ионами полупроводника. При этом электронная подсистема остается незадействованной. Иначе, это взаимодействие фотона с фононом (оно квантовано, но линии довольно широкие); $\alpha \sim 10^3 \text{ см}^{-1}$ (в резонансе).

5) Экситонное.

В зависимости от того, с помощью какого механизма и в каком виде высвобождается энергия возбужденного носителя, можно выделить основные виды рекомбинации:

- 1) излучательная рекомбинация;
- 2) безызлучательная рекомбинация;
- 3) ударная рекомбинация.

В результате излучательной рекомбинации возникают световые кванты. Вероятность излучательной рекомбинации может быть рассчитана квантовомеханически (для водородоподобных и для глубоких уравнений), и на основе применения принципа детального равновесия (для центров с различными сечениями). Известна зависимость излучательной рекомбинации от сильного электрического поля, от слабых и сильных световых потоков, а также от упругой деформации.

В результате безызлучательной рекомбинации выделяющаяся при переходе неравновесного носителя на локальный центр энергия переходит в энергию тепловых колебаний решетки. Вероятность безызлучательной рекомбинации сильно зависит от глубины залегания уровня. В случае если центр глубокого залегания имеет значительное число возбужденных состояний, захваченный

носитель может «рассеять» свою энергию, опускаясь последовательно «по лестнице» возбужденных состояний.

Ударная рекомбинация характеризуется передачей энергии, высвобождающейся при рекомбинации другому носителю, который рассеивает ее впоследствии при взаимодействии с колебаниями решетки. Ударная рекомбинация представляет собой процесс, обратный процессу ударной ионизации.

Типичный спектр поглощения полупроводников представлен на рис. 7. Спектры оптических параметров содержат уникальную информацию об электронных явлениях в материалах, в частности в полупроводниках. В общем случае вид спектра оптического параметра зависит от условий измерений, строения полупроводниковой структуры, характеристик границ раздела, особенностей подложки и др. Изучение края поглощения позволяет получить информацию о ширине запрещенной зоны, плотности электронных состояний дна зоны проводимости и потолка валентной зоны, вероятности оптических переходов и качественно характеризует структурное совершенство материала, поглощающего излучение.

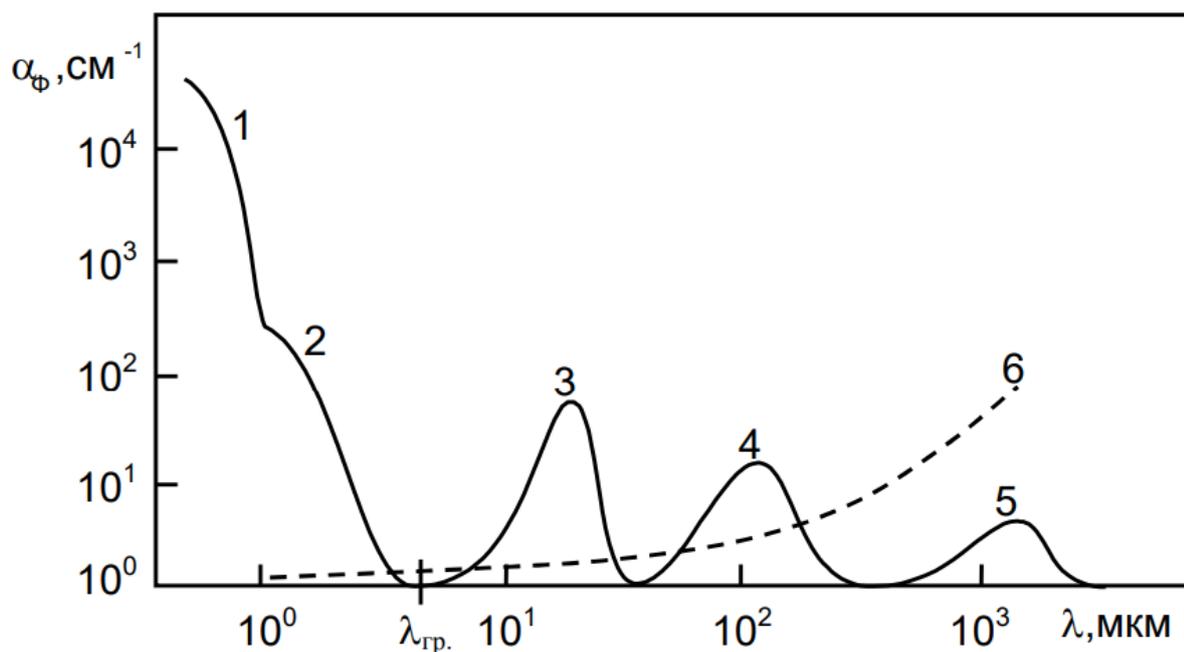


Рис. 7. Типичный спектр поглощения полупроводников: 1 - собственное поглощение в результате прямых переходов; 2 – собственное поглощение при непрямых переходах; 3,4 –примесное поглощение; 5 – решеточное поглощение; 6 – поглощение свободными носителями заряда

При собственном поглощении (участки спектра 1 и 2) происходит под действием электромагнитной волны разрыв валентной связи и переход электрона из заполненной зоны в зону проводимости. Условие этого процесса $\hbar\omega > E_g$

(энергия волны больше ширины запрещенной зоны). Часть спектра имеет четко выраженную границу. Ее часто называют «красной» границей. Для большинства полупроводников красная граница приходится на видимую или инфракрасную области оптического диапазона. При увеличении температуры, уменьшении концентрации примесей, возрастании внешнего электрического поля граница собственного поглощения сдвигается в сторону больших длин волн (в красную область). Абсолютное значение коэффициентов поглощения достигает 10^6 см^{-1} .

Примесное поглощение (области 3 и 4) связано с ионизацией атомов примеси. Энергия ионизации атомов примеси меньше ширины запрещенной зоны полупроводника и наблюдается чаще всего в инфракрасной области спектра. Величина коэффициентов поглощения уменьшается с увеличением температуры и не превышает 10^3 см^{-1} .

Решеточное поглощение (область 5) сопровождается повышением температуры полупроводника. Данная полоса поглощения находится в инфракрасной области спектра.

Поглощение свободными носителями заряда (область 6) дает непрерывный спектр поглощения в инфракрасной области, вызывается энергетическими переходами носителей в пределах разрешенных зон.

Еще возможно экситонное поглощение. При нем электрон в валентной зоне возбуждается и образует с дыркой связанную кулоновским взаимодействием дырку.

При изучении собственного поглощения полупроводника следует учитывать строение его энергетических зон. В соответствии с конфигурацией зоны проводимости и валентной зоны полупроводники делят на две группы: «прямозонные» и «непрямозонные» полупроводники.

В работах Иоффея и Регеля было сделано предположение о том, что фундаментальные электронные свойства твердого тела, независимо от того, металл это, полупроводник или диэлектрик, определяются, в основном, ближним порядком. Поскольку в атомной решетке стекла есть ближний порядок, зонная структура стекла и кристалла того же химического состава почти не отличается.

В области сильного поглощения света (собственного поглощения) выполняется закон.

$$\alpha \hbar \omega = B(\hbar \omega - E_g)^r \quad (2.13)$$

где B – коэффициент пропорциональности (постоянное число), r – показатель степени, зависящий от типа полупроводника, E_g – оптическая ширина запрещенной зоны.

Для определения оптической ширины запрещенной зоны кристаллических и аморфных полупроводников обычно используется метод Тауца. Для массивных полупроводников r принимает значения $1/2$, 2 , $3/2$ и 3 , которые соответствуют разрешенным прямым, разрешенным непрямым, неразрешенным прямым и неразрешенным непрямым переходам.

Согласно методу Тауца надо преобразовать выражение (2.13) к виду $(\alpha \cdot hv)^{1/r} = f(hv)$, построить график этой зависимости, выделить на нем линейный участок и экстраполировать его до пересечения с осью абсцисс. Точка пересечения соответствует величине E_g . Метод Тауца хорошо описывает край полосы поглощения идеального монокристаллического полупроводника, у которого $\alpha = 0$ при $hv < E_g$. Кроме того, приближенное значение E_g иногда определяется на некотором уровне поглощения: $\alpha = 10^3 \text{ см}^{-1}$ или $\alpha = 10^4 \text{ см}^{-1}$.

При взаимодействии электронов полупроводника с электромагнитным излучением должны выполняться закон сохранения энергии и закон сохранения квазиимпульса:

$$E' = E + \hbar\omega \quad (2.14)$$

$$p' = p + \hbar k \quad (2.15)$$

E , p – энергия и квазиимпульс электрона до взаимодействия с фотоном; E' , p' – после взаимодействия; $\hbar\omega$ – энергия фотона; $\hbar k$ – импульс фотона.

Импульс фотона очень мал по сравнению с квазиимпульсом электрона, поэтому им можно пренебречь, так что $p' = p$. Последнее соотношение показывает, что при взаимодействии электрона в кристалле с полем излучения возможны только такие переходы, при которых квазиимпульс (волновой вектор) электрона сохраняется. Эти переходы принято называть вертикальными, или прямыми.

При изучении собственного поглощения материала следует учитывать особенности его зонной структуры. Полупроводники можно разделить на две группы, в которых механизмы межзонных переходов существенно различаются:

- прямозонные;
- непрямоzonные.

В прямозонных полупроводниках экстремумы валентной зоны и зоны проводимости расположены в одной и той же точке зоны Бриллюэна, обычно в точке $k = 0$, что обеспечивает выполнение закона сохранения квазиимпульса. К прямозонным полупроводникам относятся такие широко используемые материалы, как арсенид галлия, нитрид галлия, антимонид индия и ряд других. Для полупроводников, у которых зона проводимости и валентная зона обладают сферической симметрией, коэффициент собственного поглощения для прямых разрешенных переходов выражается формулой

$$\alpha \hbar\omega = A(\hbar\omega - E_g)^{1/2}, \quad \hbar\omega \geq E_g \quad (2.16)$$

$$\alpha = 0, \quad \hbar\omega \leq E_g \quad (2.17)$$

Следует также различать разрешенные и запрещенные оптические переходы.

Если матричный элемент перехода отличен от нуля в первом порядке теории возмущений, то такой переход называют разрешенным. На рис. 8 показан прямой разрешенный переход.

В соответствии с законом сохранения энергии прямые межзонные переходы возможны лишь тогда, когда энергия фотона превышает ширину запрещенной зоны полупроводника, или для излучения с длиной волны, не превышающей некоторого критического значения, называемого краем собственного поглощения.

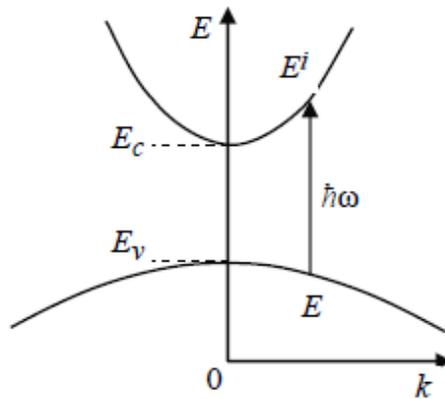


Рис. 8. Собственное межзонное поглощение при прямых межзонных переходах

В непрямозонных полупроводниках, к которым принадлежат кремний и германий, экстремумы валентной зоны и зоны проводимости расположены в разных точках зоны Бриллюэна (рис. 9). Выполнение закона сохранения квазиимпульса в этом случае обеспечивается за счет участия в процессе третьей частицы – фонона. Непрямые переходы могут происходить как с поглощением, так и с испусканием фонона; зависимость коэффициента поглощения от энергии фотона при этом разделяется на две ветви:

$$\alpha \hbar\omega = A \left[\frac{(\hbar\omega - E_g + E_p)^2}{\exp(\frac{E_p}{kT}) - 1} + \frac{(\hbar\omega - E_g - E_p)^2}{1 - \exp(-\frac{E_p}{kT})} \right], \quad \hbar\omega > E_g + E_p \quad (2.18)$$

$$\alpha \hbar\omega = A \left[\frac{(\hbar\omega - E_g + E_p)^2}{\exp(\frac{E_p}{kT}) - 1} \right], \quad \hbar\omega \leq E_g + E_p \quad (2.19)$$

Соотношения справедливы в ограниченном диапазоне изменения энергии фотонов, соответствующем переходам с энергетических уровней вблизи потолка валентной зоны на уровни вблизи дна зоны проводимости, где зависимость $E(k)$ может быть аппроксимирована параболой.

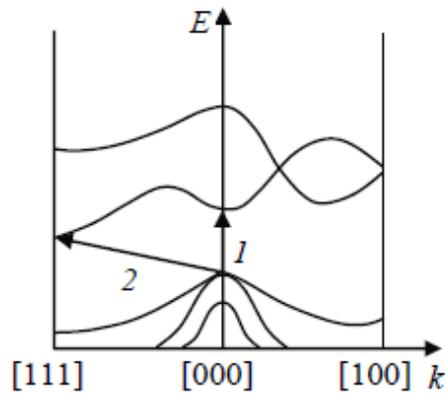


Рис. 9. Оптические переходы в полупроводнике со сложными энергетическими зонами

Для определения ширины запрещенной зоны E_g по спектру поглощения для прямых разрешенных переходов необходимо построить график зависимости квадрата произведения коэффициента поглощения на энергию фотона $(\alpha\hbar\omega)^2$ от энергии фотона $\hbar\omega$, выделить на нем линейный участок и экстраполировать его до пересечения с осью абсцисс. Точка пересечения прямой с осью позволяет определить E_g (рис. 10).

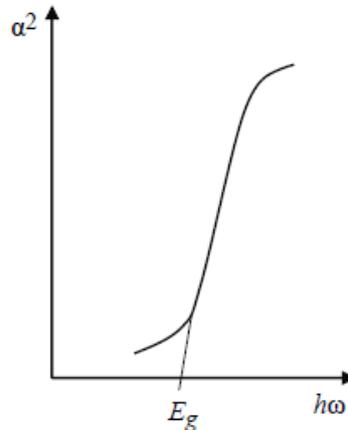


Рис. 10. Зависимость $(\alpha\hbar\omega)^2$ для прямых разрешенных переходов

В случае непрямых переходов следует построить график $(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ (рис. 11). На этом графике присутствует 2 линейных участка, соответствующих переходам с поглощением и испусканием фотона. Ширина запрещенной зоны в этом случае определяется по средней точке отрезка, ограниченного точками пересечения экстраполирующих прямых с осью абсцисс (рис. 11).

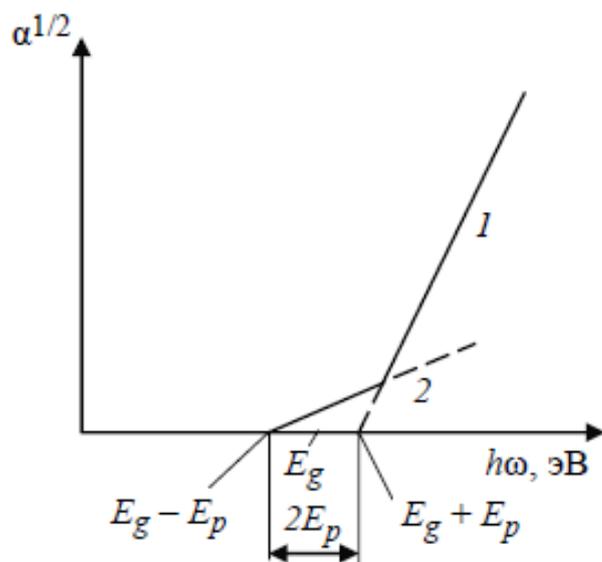


Рис. 11. Зависимость $(\alpha\hbar\omega)^{1/2}$ для непрямых разрешенных переходов

3. ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА

К оптическим методам анализа относят физико-химические методы, основанные на взаимодействии электромагнитного излучения с веществом. Это взаимодействие сопровождается явлениями, из которых наиболее важны испускание, поглощение и рассеяние излучения. Возникающие при этом сигналы несут качественную и количественную информацию о веществе. Частота сигнала отражает специфические свойства вещества, его природу, а интенсивность сигнала связана с количеством анализируемого соединения.

Оптические методы включают в себя большую группу спектральных методов анализа. Для наблюдения и исследования получаемых сигналов используются различные физические закономерности. Благодаря этому методы спектроскопии позволяют получать детальную информацию о составе, строении и количественном содержании исследуемых веществ.

Таблица 1

Области энергий электромагнитного излучения, соответствующие им методы анализа и процессы, лежащие в их основе

Спектроскопические методы	Область, длина волны	Процесс
ядерно-физические	гамма-излучение, $10^{-4} \dots 10^{-1}$ нм	ядерные реакции
рентгеновские	рентгеновская $10^{-1} \dots 10^1$ нм	изменение состояний внутренних электронов
вакуумная УФ-спектроскопия	вакуумное УФ-излучение $10 \dots 180$ нм	изменение состояний валентных электронов
оптическая УФ-спектроскопия	УФ-излучение $180 \dots 400$ нм	изменение состояний валентных электронов
спектроскопия в видимой области	видимая область $400 \dots 750$ нм	
ИК-спектроскопия, спектроскопия комбинационного рассеяния	инфракрасное излучение $10^3 \dots 10^6$ нм	изменение колебательных состояний молекул
микроволновая спектроскопия	микроволновое излучение $10^{-3} \dots 10^{-1}$ м	изменение вращательных состояний молекул
ядерный магнитный резонанс, электронный парамагнитный резонанс	радиочастотная $10^{-1} \dots 10^1$ м	изменение спинов ядер и электронов в магнитном поле

По физической природе возбуждаемых систем и соответствующих им оптических переходов спектры поглощения делятся на три типа: спектры электронных возбуждений, колебательные спектры и вращательные спектры.

3.1. Спектры электронных возбуждений

Эти спектры часто называют для краткости просто электронными оптическими спектрами. Они обусловлены переходами электронов валентных оболочек атомов на возбужденные электронные уровни. Наблюдаются для всех классов веществ [4].

В твердых телах спектры электронных возбуждений в свою очередь подразделяются на два типа:

- **Фундаментальные (или собственные) электронные спектры матрицы твердого тела.** Максимальные значения коэффициента поглощения в них достигают гигантских значений – до 10^6 см^{-1} . Для материалов, прозрачных в видимом диапазоне (оптические стекла, кристаллы оксидов и галогенидов), фундаментальные электронные спектры занимают весь вакуумный ультрафиолетовый (ВУФ) и часть ближнего ультрафиолетового диапазона, тем самым задавая их коротковолновый край собственного поглощения. Для ИК материалов (халькогенидные стекла, кристаллы кремния, германия, теллурида кадмия и др.) эти спектры смещаются в ближний УФ и видимый диапазоны. Соответственно коротковолновый край собственного поглощения таких материалов сдвигается к границе между видимым и ближним ИК диапазонами или целиком в ближний ИК диапазон.

- **Спектры электронных переходов в валентных оболочках (а) атомов или ионов примесей, (б) атомов или ионов активаторов и (в) собственных точечных дефектов (если таковые присутствуют).** Отдельные полосы поглощения или группы полос, соответствующие этим спектрам, могут наблюдаться в ближнем УФ, видимом и ближнем ИК диапазонах. Значения коэффициента поглощения в этих полосах сильно зависят от концентраций соответствующих атомов, ионов или дефектов. Более подробно эти спектры рассматриваются в одной из специальных дисциплин.

3.2. Колебательные спектры

Эти спектры обусловлены переходами атомных групп или ионов на возбужденные колебательные уровни. Наблюдаются для всех классов веществ, кроме веществ с чисто гомеополярными химическими связями. В твердых телах колебательные спектры в свою очередь подразделяются на несколько типов [4]:

- **Фундаментальные спектры (или колебательные спектры первого порядка) матрицы твердого тела.** Максимальные значения коэффициента поглощения в них достигают значений порядка 10^4 см^{-1} . Для веществ, состоящих из легких атомов (например, воды), фундаментальные колебательные спектры располагаются в высокочастотной части среднего ИК диапазона. Для оптических сте-

кол и кристаллов фундаментальные колебательные спектры занимают не только средний, но и дальний ИК диапазоны.

- Многофононные колебательные спектры (или колебательные спектры второго, третьего и т. д. порядка) матрицы твердого тела. Эти спектры образуют системы полос поглощения последовательно убывающей интенсивности, которые могут простираются от высокочастотной части среднего ИК диапазона до видимого.

- Колебательные спектры примесных групп или молекул (как фундаментальные, так и многофононные).

3.3. Вращательные спектры

Вращательные спектры свойственны, как правило, только низкомолекулярным веществам (например, водяному пару), молекулы которых способны совершать вращения независимо друг от друга [4]. Эти спектры обусловлены переходами между различными вращательными уровнями.

4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

4.1. Методы измерения коэффициентов преломления

Метод измерения коэффициента преломления следует выбирать в зависимости от предельной погрешности измерений и экономической целесообразности выполнения требований к изготовлению образца для измерений, установленных для каждого метода (ГОСТ 28869–90).

Оптический параметр n , а также коэффициент экстинкции k не поддаются прямым измерениям и могут быть определены только по экспериментально измеренным величинам.

Известны следующие методы:

1. метод на основе измерения углов преломления, в том числе угла минимального отклонения призмы. Использует закон Снеллиуса. Подходит для образцов высокой прозрачности;

2. метод на основе измерения пропускательной и отражательной способностей слоя для света, падающего под углом, близким к нормальному. Для данного метода требуется оптимальная прозрачность образцов;

3. метод на основе измерения отражения при малом угле падения, близким к нормальному, в широком диапазоне частот (длин волн). В данном методе фазовый сдвиг отраженного света получается из соотношения Крамерса – Кронига (косвенное определение), возможны измерения в спектральных областях, где образец сильно непрозрачен;

4. эллипсометрический метод. В этом методе осуществляются прямые измерения отношения амплитуд и фазовых сдвигов отраженного света. Метод предъявляет высокие требования к оптическим элементам: поляризаторам и замедляющим системам;

5. метод на основе анализа измеренных отражательных способностей для падающего света различных поляризаций и для углов наклонного падения на основе формул Френеля. Подходит для образцов с большой поверхностью, так как с увеличением угла падения увеличивается площадь поверхности, на которую падает световой луч;

6. метод Брюстера. Этот метод является частным случаем метода 5. В этом случае соблюдается соотношение между коэффициентом преломления материала и углом падения на него естественного света, при котором отраженный от поверхности материала свет полностью поляризован. Такой угол называется углом Брюстера $\phi_{\text{Бр}}$. Для данного метода может использоваться эллипсометр. Образцы должны представлять собой полубесконечную среду.

В большинстве лабораторий имеются установки для измерения спектральных зависимостей пропускания и отражения образцов. Согласно использованной литературе, исследование спектральных зависимостей пропускания и отражения сильно подвержено влиянию формы, размеров и обработки поверхности образца (рис. 12).

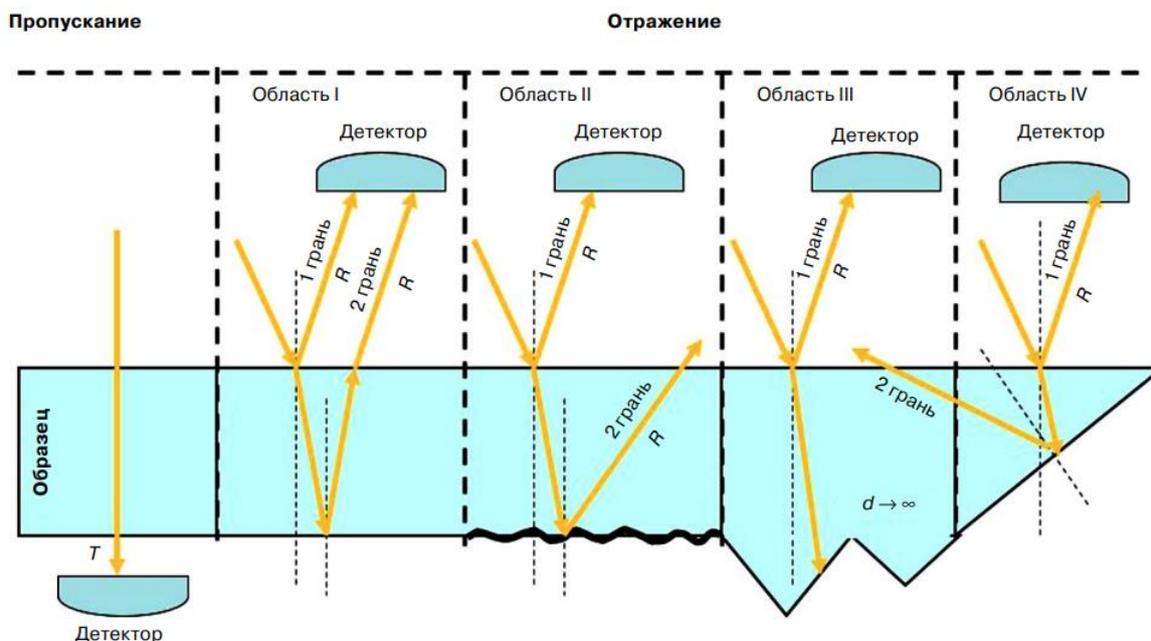


Рис. 12. Ход луча при измерении коэффициента отражения и пропускания на образцах разной формы

При измерении значений коэффициента отражения на образцах в виде полированных с двух сторон пластин малой толщины необходимо учитывать влияние многократного отражения при обработке результатов (рис. 12, область I).

Прямое измерение значений коэффициента отражения от одной грани можно осуществить на следующих образцах:

- в виде пластины с одной шлифованной стороной (рис.12, область II);
- в виде полированной с двух сторон пластины большой толщины (рис. 12, область III), так как влияние многократного отражения чрезвычайно мало;
- в виде призмы или пластины с непараллельными гранями (рис. 12, область IV).

Если пренебречь возможностью интерференции в полностью прозрачной плоскопараллельной пластине ее суммарный коэффициент отражения R_{tot} с учетом многократного отражения задается выражением:

$$R_{tot} = \frac{2R}{1+R}, \quad (4.1)$$

где R – значение коэффициента отражения от одной грани.

В случае определения значения коэффициента отражения от одной грани для полированной пластины в областях прозрачности необходимо воспользоваться формулой

$$R = \frac{R_{tot}}{2 - R_{tot}} \quad (4.2)$$

4.2. Определение коэффициента преломления пленок по спектрам пропускания (метод огибающих)

Измерение оптических параметров – коэффициентов поглощения (α), отражения (r), пропускания (T), преломления (n), коэффициент ослабления (k_0), толщины (d) тонких пленок и определение на их основе ширины запрещенной зоны (E_g) представлено в работе J.C. Manifacier. Автор подчеркивает, что из-за многократных отражений в подложке и пленке, задача установления связи между R и T и оптическими константами не тривиальна. Обычно делается несколько упрощающих предположений для получения связи измеряемых величин R , T , α , n и k_0 .

Формулы Френеля, полученные для границы раздела двух непоглощающих сред, могут быть обобщены для случая, когда световая волна падает на границу с поглощающей средой. Из электродинамики известно, что поглощающие среды в отличие от диэлектриков характеризуются комплексным значением диэлектрической проницаемости, следовательно, и комплексным показателем преломления:

$$\tilde{n} = n - ik_0 \quad (4.3)$$

Действительная часть комплексного показателя преломления определяет скорость распространения волны в веществе, а его мнимая часть характеризует затухание волны при ее распространении в поглощающей среде и называется показателем поглощения. Величины n и k_0 определяют оптические свойства вещества и их часто называют оптическими константами. При падении света на плоскую поверхность поглощающей среды, формулы Френеля сохраняют свой вид, с той только разницей, что действительный показатель преломления заменяется комплексной величиной \tilde{n} .

В работе используется известное соотношение:

$$T = \frac{(1-R_1)(1-R_2)(1-R_3)\exp(-\alpha d)}{(1-R_2R_3)\{1-[R_1R_2+R_1R_3(1-R_2)^2]\exp(-2\alpha d)\}} \quad (4.4)$$

$$R_1 = |(n-1)^2 + k_0^2| / |(n+1)^2 + k_0^2| \quad (4.5)$$

$$R_2 = |(n-n_1)^2 + k_0^2| / |(n+n_1)^2 + k_0^2| \quad (4.6)$$

$$R_3 = |(n_1 - 1)^2|/|(n_1 + 1)^2| \quad (4.7)$$

Из (3) можно получить

$$k_0 = \sqrt{\frac{4nn_1 - (n+n_1)^2}{1-R_2} + \frac{R_2}{1-R_2} (n+n_1)^2} \quad (4.8)$$

Из (5) можно получить

$$n_1 = \frac{1+\sqrt{R_3}}{1-\sqrt{R_3}} \quad (4.9)$$

Коэффициенты преломления и поглощения тонких пленок обычно определяются либо сложными компьютерными итерационными процедурами с использованием спектров пропускания и отражения, либо с использованием простого процесса, разработанного J C Manifacier,. В работе R. Swaneroel показано, что методика J C Manifacier содержит некоторые ошибки. Рассмотрим методику, предложенную в работе R. Swaneroel и сравним ее с наиболее часто применяемыми методиками.

На рис. 13 схематически показано возникновение интерференции в слабо поглощающей (прозрачной) пленке толщиной d с показателями преломления n и поглощения k , нанесенной на прозрачную подложку с показателем преломления n_1 ($n > n_1$, $n \gg k$).

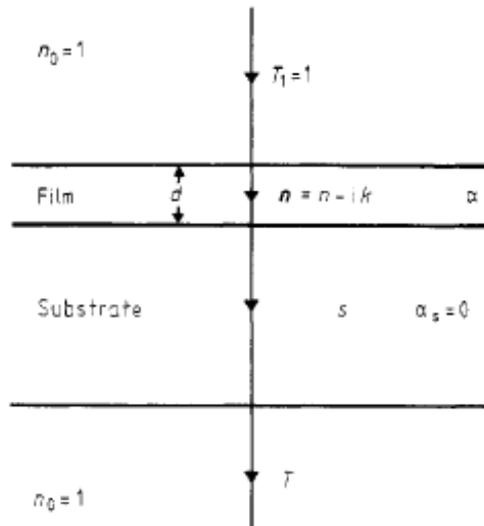


Рис. 13. Схема возникновения интерференции в слабопоглощающей (прозрачной) пленке толщиной d с показателями преломления n и поглощения k , нанесенной на прозрачную подложку с показателем преломления s ($n > s$, $n \gg k$)

Падающий свет частично отражается от верхней поверхности пленки, образуя пучок 1, частично же преломляется. Прошедший внутрь пленки свет в свою очередь испытывает частичное отражение от нижней ее поверхности;

возникающий при этом пучок, после преломления на верхней поверхности пленки, образует пучок 2. Поскольку при каждом прохождении света через границы раздела пленка-воздух и пленка-подложка возникают отраженные внутрь пленки световые пучки, то описанный процесс может быть достаточно сложным. Однако, если отражающие способности этих границ раздела не очень велики, то интерференция будет иметь место в основном между первыми двумя отраженными (1 и 2) или первыми двумя прошедшими (1' и 2') пучками. Если выполняется условие

$$2d\sqrt{n^2 - \sin^2 i} = (m + \frac{1}{2})\lambda, \quad (4.10)$$

то в отраженном свете будут наблюдаться интерференционные максимумы, в случае, когда справедливо равенство

$$2d\sqrt{n^2 - \sin^2 i} = (2m + \frac{3}{2})\lambda, \quad (4.11)$$

– интерференционные минимумы. В формулах (2) и (3) $m = 1, 2, \dots$ – целые числа (порядки интерференции). В проходящем свете условия максимумов и минимумов меняются местами.

Из соотношений следует, что, если пленку освещать светом, содержащим волны разных длин, то длины волн интерференционных экстремумов зависят от показателя преломления пленки и ее толщины. Поэтому, по интерференционной картине, наблюдаемой в спектрах пропускания (отражения), можно определить оптические постоянные пленки и ее толщину.

На рис. 13 теоретический спектральный коэффициент пропускания (сплошная кривая) пленки кремния толщиной 1 мкм, осажденной на стеклянной подложке конечного размера и огибающие (пунктирные). По этому спектру и по огибающим можно определить показатели преломления и поглощения, толщину и оптическую ширину запрещенной зоны.

Для толстой подложки в отсутствие пленки (поглощение в подложке также отсутствует) для коэффициента пропускания известно выражение:

$$T_s = \frac{(1-R)^2}{1-R^2}, \quad (4.12)$$

где

$$R = [(s - 1)/(s + 1)]^2 \quad (4.13)$$

или

$$T_s = \frac{2s}{s^2 + 1} \quad (4.14)$$

и

$$s = \frac{1}{T_s} + \left(\frac{1}{T_s^2} - 1\right)^{1/2} \quad (4.15)$$

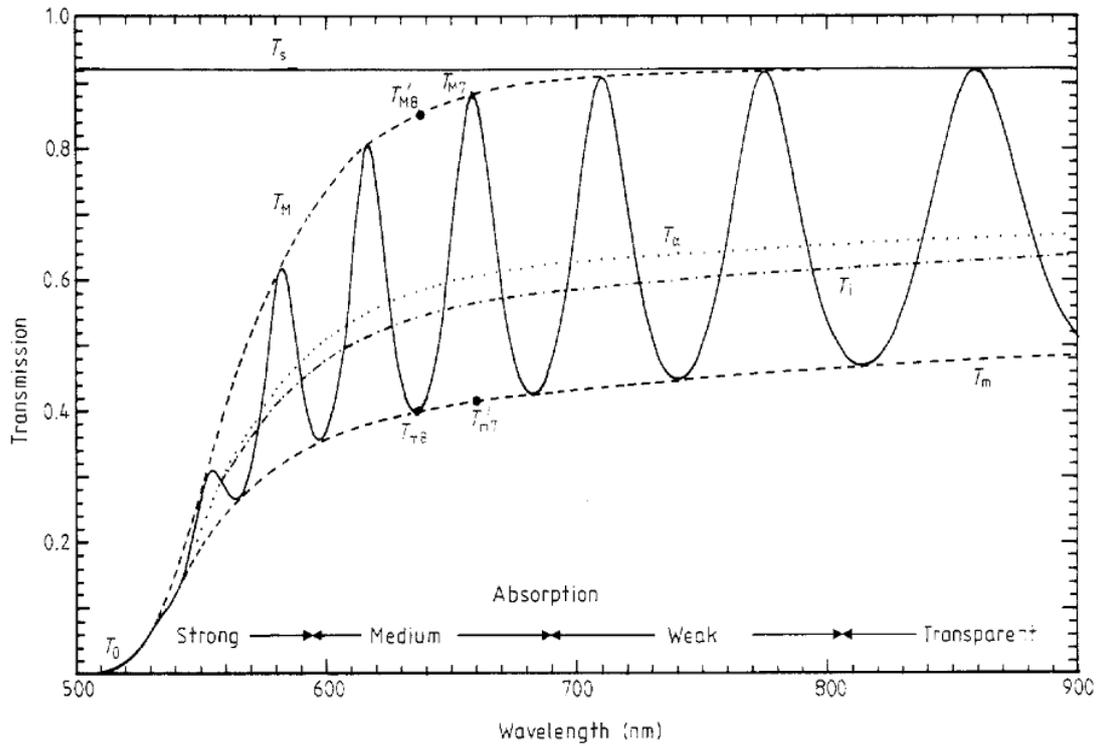


Рис. 14. Теоретический спектральный коэффициент пропускания (сплошная кривая) пленки кремния толщиной 1 мкм, осажденной на стеклянной подложке конечного размера и огибающие (пунктирные)

Для коэффициента пропускания (рис. 14) T является функцией нескольких переменных

$$T = T(\lambda, s, n, d, \alpha) \quad (4.16)$$

Если s известно, то вводя функцию x , зависящую от поглощения α в пленке

$$x = \exp(-\alpha d) \quad (4.17)$$

можно записать, что

$$T = T(n, x) \quad (4.18)$$

Выражение для коэффициента пропускания в системе пленка-подложка согласно J C Manifacier задается следующим уравнением

$$T = \frac{16n_1(n^2+k^2)\alpha n_0}{A+B\alpha^2+2\alpha[C\cos(\frac{4\pi nd}{\lambda})+D\sin(\frac{4\pi nd}{\lambda})]}, \quad (4.19)$$

$$A = [(n + n_0)^2 + k^2][(n + n_1)^2 + k^2], \quad (4.20)$$

$$B = [(n - n_0)^2 + k^2][(n - n_1)^2 + k^2], \quad (4.21)$$

$$C = -(n^2 - n_0^2 + k^2)(n^2 - n_1^2 + k^2) + 4k^2n_0n_1, \quad (4.22)$$

$$D = 2kn_1(n^2 - n_0^2 + k^2) + 2kn_0(n^2 - n_1^2 + k^2) \quad (4.23)$$

здесь

$$\alpha = \exp\left(-\frac{4\pi kd}{\lambda}\right) = \exp(-Kd) \quad (4.24)$$

Следует отметить, что если сравнивать с рис. 14 и работой R. Swanepoel , то следует n_1 заменить на s , $\alpha \equiv x$, $n_0 = 1$. Т. е. В работе R. Swanepoel для коэффициента пропускания приводятся уравнения

$$T = \frac{A'x}{B' - C'x - D'x^2} \quad (4.25)$$

$$A' = 16s(n^2 + k^2) \quad (4.26)$$

$$B' = [(n + 1)^2 + k^2][(n + 1)(n + s^2) + k^2] \quad (4.27)$$

$$C' = [(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2) - 2k^2(s^2 + 1)]2\cos\varphi - k[2(n^2 - s^2 + k^2) + (s^2 + 1)(n^2 - 1 + k^2)]2\sin\varphi \quad (2.28)$$

$$D' = [(n - 1)^2 + k^2][(n - 1)(n - s^2) + k^2] \quad (4.29)$$

$$\varphi = 4\pi nd/\lambda, \quad x = \exp(-\alpha d), \quad \alpha = 4\pi k/\lambda \quad (4.30)$$

В случае достаточно толстой (бесконечной) подложки коэффициент пропускания T определяется как

$$T = \frac{A''x}{B'' - C''x - D''x^2} \quad (4.31)$$

$$A'' = 16s(n^2 + k^2) \quad (4.32)$$

$$B'' = [(n + 1)^2 + k^2][(n + s^2) + k^2] \quad (4.33)$$

$$C'' = [(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - s^2 + k^2) + 4k^2s]2\cos\varphi - k[2(n^2 - s^2 + k^2) + 2s(n^2 - 1 + k^2)]2\sin\varphi \quad (4.34)$$

$$D'' = [(n - 1)^2 + k^2][(n - s^2) + k^2] \quad (4.35)$$

Коэффициент поглощения x для системы, показанной на рисунке 14, в условиях пропускания без «помех» T_α

$$x = \left\{ P + [P^2 + 2QT_\alpha(1 - R_2R_3)]^{1/2} \right\} / Q \quad (4.36)$$

$$Q = 2T_\alpha(R_1R_2 + R_1R_3 - 2R_1R_2R_3) \quad (4.37)$$

$$P = (R_1 - 1)(R_2 - 1)(R_3 - 1) \quad (4.38)$$

$$R_1 = [(1 - n)/(1 + n)]^2 \quad (4.39)$$

$$R_2 = [(n - s)/(n + s)]^2 \quad (4.40)$$

$$R_3 = [(s - 1)/(s + 1)]^2 \quad (4.41)$$

Выражения становятся намного проще, если положить $k = 0$. Согласно R. Swanepoel это приближение справедливо в большей части спектра на рисунке 14. Выражения становятся

$$T = \frac{Ax}{B - Cx \cos \varphi + Dx}, \quad (4.42)$$

$$A = 16n^2s, \quad (4.43)$$

$$B = (n - 1)^3(n + s)^2, \quad (4.44)$$

$$C = 2(n^2 - 1)(n^2 - s^2), \quad (4.45)$$

$$D = (n - 1)^3(n - s^2) \quad (4.46)$$

Экстремумы можно выразить как

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (4.47)$$

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad (4.48)$$

T_M и T_m (рис. 14) используются в конвертном методе (методе огибающих), представленного и используемого во многих работах.

4.2.1. Процедура вычислений

В первую очередь рассматривается *область прозрачности*, в которой или $\alpha=0$ или $x=1$. В этой области

$$T_M = \frac{2s}{s^2+1} \quad (4.49)$$

То есть здесь в максимумах кривая соприкасается с кривой зависимости пропускания чистой подложки (T_s). Рассматривая уравнения, можно записать

$$T_m = \frac{4n^2s}{n^4+n^2(s^2+1)+s^2} \quad (4.50)$$

Или

$$n = [M + (M^2 - s^2)^{1/2}]^{1/2} \quad (4.51)$$

$$M = \frac{2s}{T_m} - \frac{s^2+1}{2} \quad (4.52)$$

В области слабого и среднего поглощения (рис. 13) $\alpha \neq 0$ и $x < 1$ можно получить

$$\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T_M} = \frac{2C}{A} \quad (4.52)$$

Для n в этой области можно получить выражение

$$n = [N + (N^2 - s^2)^{1/2}]^{1/2} \quad (4.53)$$

$$N = 2s \frac{T_M - T_m}{T_m T_M} + \frac{s^2+1}{2} \quad (4.54)$$

Данное уравнение предложено также в работе R. Swanepoel для определения $n(\lambda)$. После вычисления $n(\lambda)$ можно определить и x

$$x = \frac{E_M - [E_M^2 - (n^2 - 1)^3 (n^3 - s^4)]^{1/2}}{(n-1)^3 (n-s^2)} \quad (4.55)$$

$$E_M = \frac{8n^2s}{T_M} + (n^2 - 1)(n^2 - s^2) \quad (4.56)$$

или

$$x = \frac{E_m - [E_m^2 - (n^2 - 1)^3 (n^3 - s^4)]^{1/2}}{(n-1)^3 (n-s^2)} \quad (4.57)$$

$$E_m = \frac{8n^2s}{T_m} - (n^2 - 1)(n^2 - s^2) \quad (4.58)$$

Складывая выражения для минимумов и максимумов

$$\frac{2T_M T_m}{T_M + T_m} = \frac{Ax}{B + Dx^2} \quad (4.59)$$

Разрешая относительно x

$$x = \frac{F - [F^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - s^4)]^{1/2}}{(n-1)^3 (n-s^2)} \quad (4.60)$$

где

$$F = \frac{8n^2 s}{T_i} \quad (4.61)$$

$$T_i = \frac{2T_M T_m}{T_M + T_m} \quad (4.62)$$

Из уравнений видно, что T_i представляет собой кривую, проходящую, как показано на рисунке 13. Коэффициент пропускания без поглощения T , может быть рассчитан из интерференционных полос путем интегрирования уравнения между максимумом и смежным минимумом

$$T_\alpha = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{Ax}{B - Cx \cos \varphi + Dx^2} d\varphi \quad (4.63)$$

Выбирая узкую область суммирования, где все параметры постоянные, интеграл дает

$$T_\alpha = \frac{Ax}{[(B - Cx + Dx^2)(B + Cx + Dx^2)]^{1/2}} \quad (4.64)$$

$$T_\alpha = \sqrt{T_M T_m} \quad (4.65)$$

Для x выражение

$$x = \frac{\{G - [G^2 - (n^2 - 1)^6 (n^2 - s^4)^2]^{1/2}\}^{1/2}}{(n-1)^3 (n-s^2)} \quad (4.66)$$

$$G = \frac{128n^4 s^2}{T_\alpha^2} + n^2 (n^2 - 1)^2 (s^2 - 1)^2 + (n^2 - 1)^2 (n^2 - s^2)^2 \quad (4.67)$$

Уравнение (4.67) эквивалентно часто используемому уравнению в оптических и инфракрасных исследованиях. Оно также может быть использовано для определения n из T в прозрачной области, где $x = 0$. Приравнявая x к 1 из этого уравнения можно получить для n

$$n = [H + (H^2 - s^2)^{1/2}]^{1/2} \quad (4.68)$$

$$H = \frac{4s^2}{(s^2-1)T_\alpha^2} - \frac{s^2+1}{2} \quad (4.69)$$

В работе J C Manificier, для x приводится формула

$$x = \frac{(n-1)(s+n)\left[1-\left(\frac{T_M}{T_m}\right)^{1/2}\right]}{(n-1)(s-n)\left[1+\left(\frac{T_M}{T_m}\right)^{1/2}\right]} \quad (4.70)$$

В области сильного поглощения (рис. 13) интерференция отсутствует. В этой области труднее определить значения n и x . Эти значения получают путем экстраполяции значений, полученных в областях слабого поглощения. Для больших значений α все четыре кривые T_M , T_m , T_i и T_α перекрываются с T_0 . В отсутствие интерференционных эффектов при $x \ll 1$ можно записать

$$T_0 \cong Ax/B \quad (4.71)$$

или

$$x \approx \frac{(n-1)^3(n+s^2)}{16n^2s} T_0 \quad (4.72)$$

4.3. Определение коэффициента преломления пленок по спектрам отражения (метод огибающих)

Для расчета спектра отражения уравнения работы Ю.И. Уханов.

$$R_1 = \frac{(g_1^2+h_1^2)e^\gamma+(g_2^2+h_2^2)e^{-\gamma}+A\cos\delta_2+B\sin\delta_2}{e^\gamma+(g_1^2+h_1^2)(g_2^2+h_2^2)e^{-\gamma}+C\cos\delta_2+D\sin\delta_2} \quad (4.73)$$

$$A = 2(g_1g_2 + h_1h_2) \quad (4.74)$$

$$C = 2(g_1g_2 - h_1h_2) \quad (4.75)$$

$$B = 2(g_1h_2 - h_1g_2) \quad (4.76)$$

$$D = 2(g_1h_2 + h_1g_2) \quad (4.77)$$

$$g_1 = \frac{n_1^2-n_2^2-k_2^2}{(n_1+n_2)^2+k_2^2} \quad (4.78)$$

$$g_2 = \frac{n_2^2-n_3^2+k_2^2-k_3^2}{(n_2+n_3)^2+(k_2+k_3)^2} \quad (4.79)$$

$$h_1 = \frac{2n_1k_2^2}{(n_1+n_2)^2+k_2^2} \quad (4.80)$$

$$h_2 = \frac{2(n_2 k_3 - n_3 k_2)}{(n_2 + n_3)^2 + (k_2 + k_3)^2} \quad (4.81)$$

$$\gamma = \frac{4\pi k_2 d_2}{\lambda} \quad (4.82)$$

$$\delta_2 = \frac{4\pi}{\lambda} n_2 d_2 \quad (4.83)$$

Для спектра пропускания огибающие кривые по верхним и нижним экстремумам соответствуют

$$T_M = \frac{A'x}{B' - C'x + D'x^2} \quad (4.84)$$

$$T_m = \frac{A'x}{B' + C'x + D'x^2} \quad (4.85)$$

Для спектра отражения огибающие кривые по верхним и нижним экстремумам соответствуют

$$R_M = \frac{(g_1^2 + h_1^2)e^\gamma + (g_2^2 + h_2^2)e^{-\gamma} - A}{e^\gamma + (g_1^2 + h_1^2)(g_2^2 + h_2^2)e^{-\gamma} - C} \quad (4.86)$$

$$R_m = \frac{(g_1^2 + h_1^2)e^\gamma + (g_2^2 + h_2^2)e^{-\gamma} + A}{e^\gamma + (g_1^2 + h_1^2)(g_2^2 + h_2^2)e^{-\gamma} + C} \quad (4.87)$$

Теоретические спектры пропускания и отражения, а также значения огибающих кривых, представлены на рис. 15.

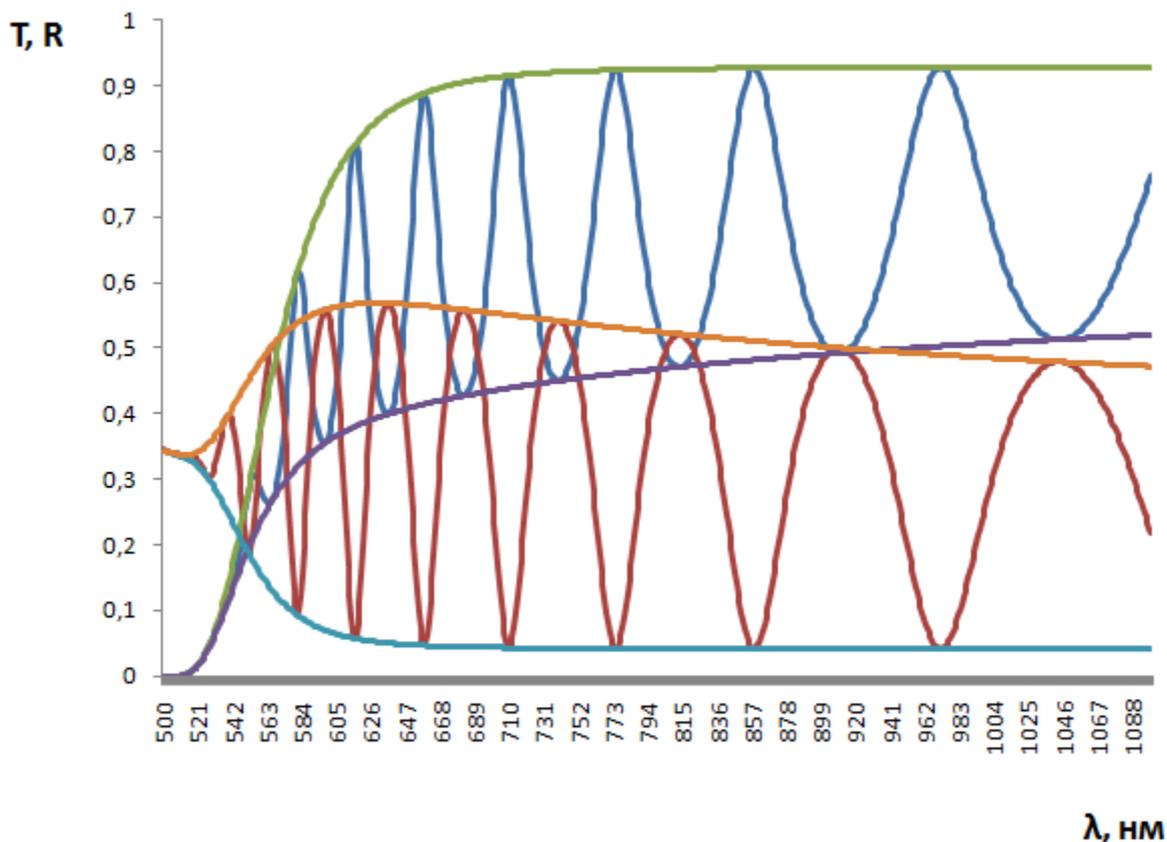


Рис. 15. Теоретические спектры пропускания и отражения и их огибающие

4.4. Ограничения методов «огибающих»

Ограничение метода огибающих обуславливается физическими свойствами измеряемых пленок, то есть исследуемая пленка должна удовлетворять следующим критериям:

- ✓ Отсутствие узких полос поглощения в областях между интерференционными экстремумами.
- ✓ Довольно низкое поглощение, чтобы интерференционные экстремумы были отчетливо различимы в спектре.
- ✓ Достаточно высокая оптическая толщина ($n \cdot d$), чтобы в спектре пропускания присутствовало несколько интерференционных экстремумов (оптическая толщина больше, чем 400 нм в видимой и ближней ИК области).
- ✓ Разница между показателями преломления пленки и подложки должна быть как можно выше, что необходимо для четкости интерференционной картины.

При невыполнении вышеуказанных условий, применение метода огибающих затруднительно, либо невозможно.

4.5. Возможности использования спектральных измерений для определения характеристик толстых пленок в отсутствие интерференции

При вычислениях можно сначала определить спектральный коэффициент поглощения α пленок с использованием, так называемого «ВСС метода» (Brodsky, Cardona, Cuomo). Этот метод, если $\alpha \cdot d > 0.1$ позволяет достичь точности $\pm 10\%$ для α

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \left[\frac{T(1-T_s)^2}{\sqrt{4T_s^2 + T^2(1-T_s^2)^2 - 2T_s}} \right], \quad (4.88)$$

где T_s – коэффициент пропускания подложки, T – пропускание системы пленка-подложка, d – толщина пленки. Ошибки в нахождении коэффициента поглощения методом ВСС, согласно литературным данным, являются, главным образом, функцией оптического пути, и в меньшей степени показателя преломления. Затем определить приближенное значение показателя преломления и поглощения по формулам работы S.I. Abbas

$$n = \left(\frac{1+R}{1-R} \right) + \sqrt{\frac{4R}{1-R} - k^2}, \quad k = \frac{\alpha \lambda}{4\pi}. \quad (4.89)$$

Далее аппроксимировать значения показателя преломления n и показателя экстинкции k функцией Коши, аппроксимированные значения подставляли в уравнения для расчета теоретических коэффициентов пропускания и отражения. Уточнить значения характеристик пленок так, чтобы экспериментальные и теоретические спектры пропускания и отражения отличались не более чем на 10 %. Вычислить функцию невязки.

4.6. Возможности использования спектральных измерений для определения характеристик тонких прозрачных пленок в отсутствие интерференции

По спектрам отражения с учетом того, что пленки в исследуемой области света являются прозрачными ($n^2 \gg k^2$), можно определить первое приближение значения показателя преломления $n(\lambda)$ согласно формуле:

$$n = \frac{1+\sqrt{R}}{1-\sqrt{R}}. \quad (4.90)$$

Коэффициент поглощения $\alpha(\lambda)$ рассчитать с учетом однократного отражения

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{(1-R)}{T}. \quad (4.91)$$

Полученные значения n использовать для расчета теоретических коэффициентов пропускания и отражения по формулам, представленным в работе Ельциной О.С.

$$T = \frac{(1-R_1)(1-R_2)e^{-2\alpha d}}{(1-R_1)e^{-2\alpha d}}, \quad (4.92)$$

$$R = R_1 + \frac{R_2(1-R_2)^2 e^{-2\alpha d}}{1-R_1 R_2 e^{-\alpha d}}. \quad (4.93)$$

Здесь $R_1 = \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2$, $R_2 = \left(\frac{n-n_2}{n+n_2}\right)^2$, где n и n_2 – показатели преломления пленки и подложки.

Уточнить значения характеристик пленок так, чтобы экспериментальные и теоретические спектры пропускания и отражения отличались не более чем на 10 %. Вычислить функцию невязки.

4.7. Проверка правильности вычислений коэффициента преломления

Методики определения коэффициентов преломления по спектрам пропускания и отражения относятся к непрямым методам измерения или к так называемому методу решения обратных задач в физике. Для проверки правильности нахождения данных коэффициентов необходимо найти теоретические спектры пропускания и/или отражения пленок с использованием аппроксимирующих функций $n(\lambda)$ и $k(\lambda)$, а также толщины пленки d и произвести совмещение измеренного и теоретического (модельного) спектров. Совмещение спектров можно проводить подбором параметров модели. Точность определения параметров n , k и d должна составлять 2–3%. Точность определения решения обратных задач в физике можно описать функцией невязки

$$\sum_i \{T^{meas}(\lambda_i) - T^{theor}(\lambda_i, d, n(\lambda_i), \alpha(\lambda_i))\}^2 \quad (4.94)$$

и/или

$$\sum_i \{R^{meas}(\lambda_i) - R^{theor}(\lambda_i, d, n(\lambda_i), \alpha(\lambda_i))\}^2 \quad (4.95)$$

Для аппроксимации показателя преломления наиболее часто используется эмпирическое дисперсионное выражение, предложенное Коши:

$$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}, \quad (4.96)$$

$$k(\lambda) = D + \frac{F}{\lambda^2} + \frac{G}{\lambda^4} \quad (4.97)$$

где A и B , D , F , G , λ_0 параметры аппроксимации

Для большинства полупроводниковых материалов показатель преломления описывается уравнением дисперсии Сельмейера

$$n(\lambda) = \left(A_n + \frac{B_n \lambda^2}{\lambda^2 - C_n^2} \right)^{1/2} \quad (4.98)$$

$$k(\lambda) = 0 \quad \text{или} \quad k(\lambda) = \left[n(\lambda) \left(B_1 \lambda + \frac{B_2}{\lambda} + \frac{B_3}{\lambda^3} \right) \right]^{-1} \quad (4.99)$$

Модель классического осциллятора Лоренца:

$$n^2 - k^2 = 1 + \frac{A \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_0^2 + g \lambda^2 / (\lambda^2 - \lambda_0^2)} \quad (4.100)$$

$$2nk = \frac{A \sqrt{g} \lambda^2}{(\lambda^2 - \lambda_0^2)^2 + g \lambda^2} \quad (4.101)$$

λ_0 – центральная длина волны осциллятора, A – прочность осциллятора и g – коэффициент демпфирования. В первой формуле, функция справа, представляет собой диэлектрическую функцию с бесконечной энергией (нулевая длина волны). Для большинства случаев, более реалистично заменить его подходящим параметром ε_∞ , представляющая диэлектрическую функцию на длинах волн много меньше, чем измеряется. Уравнения легко решаются для n и k , но дают довольно громоздкие выражения при написании. Одно из преимуществ этих уравнений перед уравнениями из Коши и Зельмайера, заключается в том, что они представляют собой совокупность сопряженных уравнения для n и k , согласующиеся с уравнениями Крамерса-Кронига (КК).

Дисперсионные отношения Форухи–Блумера были разработаны для моделирования комплексного показателя преломления кристаллических полупроводников и диэлектриков с использованием КК- уравнений:

$$k(E) = \sum_{i=1}^q \frac{A_i (E - E_g)^2}{E^2 - B_i E + C_i} \quad (4.102)$$

$$n(E) = n(\infty) + \sum_{i=1}^q \frac{B_{ni} E + C_{ni}}{E^2 - B_i E + C_i} \quad (4.103)$$

Не все параметры в уравнениях (4.100) и (4.101) независимы. Данные зависимости определяются уравнениями (4.102-4.103), в которых только $n(\infty)$, A_i ,

B_i , C_i и E_g остаются независимыми подгоночными параметрами. В литературе также отмечено, что уравнения Форухи-Блумера были по существу введены только для моделирования межзонной области материалов.

$$B_{ni} = \frac{A_i}{Q_i} \left(-\frac{B_i^2}{2} + E_g B_i - E_g^2 + C_i \right) \quad (4.104)$$

$$C_{ni} = \frac{A_i}{Q_i} \left((E_g^2 + C_i) \frac{B_i}{2} - 2E_g C_i \right) \quad (4.105)$$

$$Q_i = \frac{1}{2} (4C_i - B_i^2)^{1/2} \quad (4.106)$$

В литературе дисперсию для n и k иногда аппроксимируют упрощенными формулами Форухи-Блумера

$$k(E) = \frac{A(E-E_g)^2}{E^2 - BE + C} \quad (4.107)$$

$$n(E) = n(\infty) + \frac{B_0 E + C_0}{E^2 - DE + C} \quad (4.108)$$

где $E = \hbar\omega$ – энергия фотона, E_g – оптическая ширина запрещенной зоны; A , B , C , B_0 , C_0 – параметры аппроксимации; $n(\infty)$ – показатель преломления при высоких значениях энергии фотонов $\hbar\omega$; при величине ω , стремящейся к бесконечности, данный показатель незначительно отличается от единицы вследствие наличия поглощения в материале.

Встречаются в различных литературных источниках и другие записи данных выражений. Например, такие

$$n^2 = 1 + \frac{A_1 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_1^2} + \frac{A_2 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_2^2} + \frac{A_3 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_3^2} + \dots \quad (4.109)$$

где λ_i – постоянные, и A_1 , A_2 , A_3 , λ_1 , λ_2 , λ_3 – коэффициенты Селлмейера, характерные для конкретного материала. Частными случаями уравнения дисперсии Селлмейера являются соотношения:

$$n^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - C} + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - E}, \quad (4.110)$$

$$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - \lambda_0^2} + \frac{C}{(\lambda^2 - \lambda_0^2)^2} + D\lambda^2 + E\lambda^4 \quad (4.111)$$

где A , B , C , D , E , λ_0 – характерные константы.

Или:

$$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - \lambda_0^2}, \quad (4.112)$$

$$k(\lambda) = \frac{C}{n(\lambda) D \lambda + \frac{F}{\lambda} + \frac{1}{\lambda^2}}, \quad (4.113)$$

A и B , D , F , G , λ_0 – параметры аппроксимации.

Для расчета дисперсии показателя преломления стекла в спектральном диапазоне от 365 нм до 1013.9 нм с погрешностью аппроксимации не превышающей $\pm 1 \cdot 10^{-5}$ часто используют формулу

$$n^2 = A_1 + A_2\lambda^2 + A_3\lambda^{-2} + A_4\lambda^{-4} + A_5\lambda^{-6} + A_6\lambda^{-8} \quad (4.114)$$

Константы от A_1 до A_6 для каждой марки стекла приведены в каталоге стекла СССР-ГДР.

Соотношения Крамерса-Кронига, являющиеся удобным инструментом для исследования оптических констант полупроводниковых материалов. Реальная составляющая комплексного показателя преломления $N = n - ik$, где k – коэффициент экстинкции, представляется с помощью соотношений Крамерса-Кронига как:

$$n_a = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{k\omega}{\omega^2 - a^2} d\omega \quad (4.115)$$

где a – частота, которой соответствует показатель преломления. Используя связь между коэффициентом экстинкции и коэффициентом поглощения материала:

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (4.116)$$

соотношение Крамерса-Кронига для показателя преломления можно записать как:

$$n_a = 1 + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\alpha(\lambda)}{1 - (\lambda/\lambda_a)^2} d\lambda \quad (4.117)$$

Полученная зависимость описывает связь показателя преломления с коэффициентом поглощения полупроводника по длине волны. Эта зависимость также может быть представлена как связь показателя преломления с частотами ν и ν' :

$$n(\nu) = 1 + \frac{c}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\alpha(\nu')}{d\nu'} \log \left(\frac{\nu' + \nu}{\nu' - \nu} \right) d\nu' \quad (4.118)$$

Из формулы (4.115) следует, что графики показателя преломления будут иметь пик, положение которого обусловлено длиной волны, соответствующей ширине запрещенной зоны конкретного материала. В диапазоне длин волн вблизи границы полосы поглощения значение $d\alpha(\nu')/d\nu'$ высокое, и показатель преломления растёт с увеличением энергии фотонов. Тем не менее, когда значение энергии фотона достигает ширины запрещенной зоны, кривая поглощения изменяет наклон. Таким образом, $d\alpha(\nu')/d\nu'$ уменьшается на уровне больше ширины запрещенной зоны. За счёт такого поведения показателя поглощения возникает пик на графике зависимости показателя преломления, наблюдаемый на рис 16.

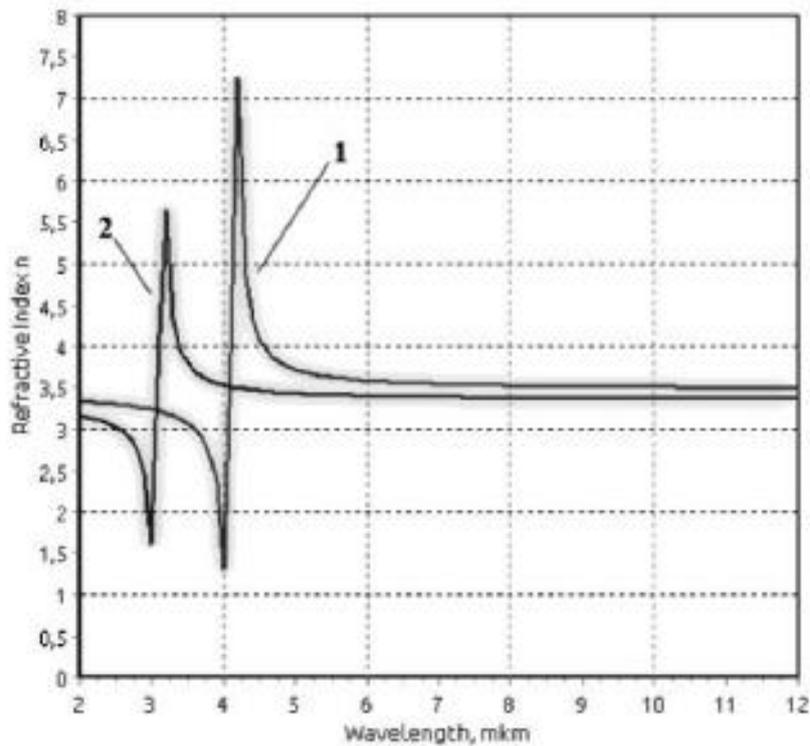


Рис. 16. Зависимость показателя преломления от длины волны.
 1: $x = 0,2$ мол. дол., 2: $x = 0,3$ мол. дол.

4.8. Определение ширины запрещенной зоны

Для определения ширины запрещенной зоны в первую очередь необходимо определить коэффициент поглощения.

Коэффициент поглощения $\alpha(\lambda)$ пленок, зависящий от их показателей поглощения $k(\lambda)$ и длины волны λ как

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (4.119)$$

определяют разными способами. Самый простой способ учитывает только потери света из-за поглощения. Согласно данному способу для определения коэффициента поглощения необходимо наличие спектра пропускания T и знание толщины пленки d :

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{1}{T} \quad (4.120)$$

Ряд авторов учитывает однократное отражение:

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{1-R}{T} \quad (4.121)$$

Другие авторы учитывают двукратное отражение:

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{|1-R|^2}{T} \quad (4.122)$$

Приводятся и более сложные выражения. Например,

$$\alpha = ((1 - R)^2 + \sqrt{(1 - R)^4 + 4T^2R^2}) / (2Td), \quad (4.123)$$

где

$$R = ((n - 1)^2 + k^2) / (((n + 1)^2 + k^2)), \quad (4.124)$$

или

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \left(\frac{[1-R]^2}{2T} + \sqrt{R^2 + \frac{[1-R]^4}{4T^2}} \right), \quad (4.125)$$

или

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{\sqrt{(1-R)^4 + 4T^2R^2} + (1-R)^2}{2T^2}, \quad (4.126)$$

или

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \left\{ \frac{(1-R)^2}{2T} \left[1 + \left[1 + \frac{4T^2R^2}{(1-R)^4} \right]^{1/2} \right] \right\} \quad (4.127)$$

В работе А. Mallikarjuna оптический коэффициент поглощения определяли по формуле

$$\alpha = -\frac{1}{d} \ln \left[\frac{T(n+1)^3(n+s)^2}{16n^2s} \right] \quad (4.128)$$

После нахождения коэффициента поглощения строятся зависимости $(\alpha \hbar \omega)^2$ для прямых разрешенных переходов (рис. 10) или $(\alpha \hbar \omega)^{1/2}$ для непрямых переходов (рис. 11).

Примеры определения ширины запрещенной зоны с использованием метода Тауца из использованной литературы представлены на рис. 17–19.

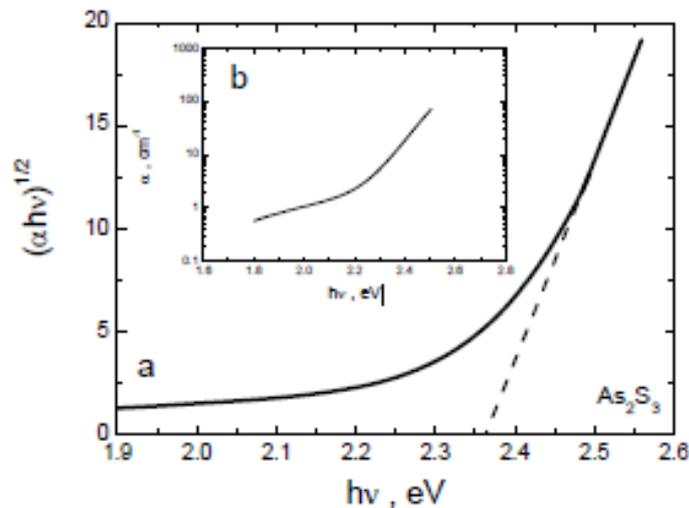


Рис. 17. Определение ширины запрещенной зоны методом Тауца (а) и коэффициент поглощения объемного стекла As_2S_3

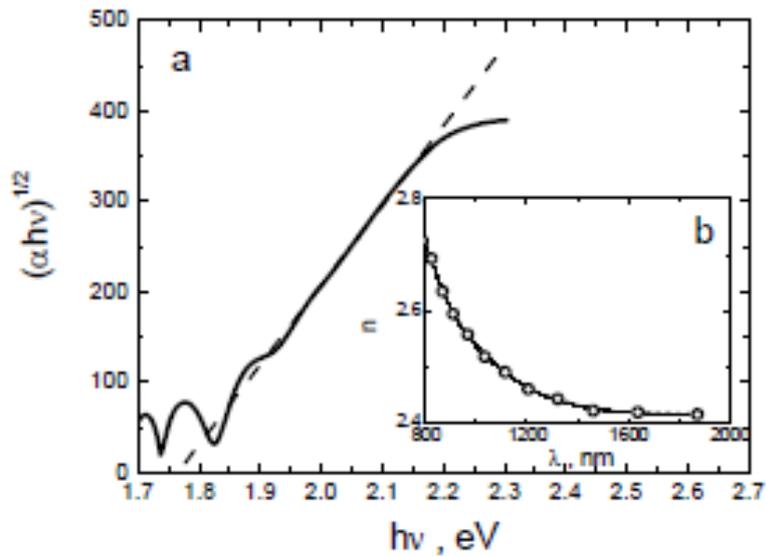


Рис. 18. Определение ширины запрещенной зоны методом Тауца (а) и коэффициент поглощения пленок толщиной 1 мкм As_2Se_3 на стеклянной подложке

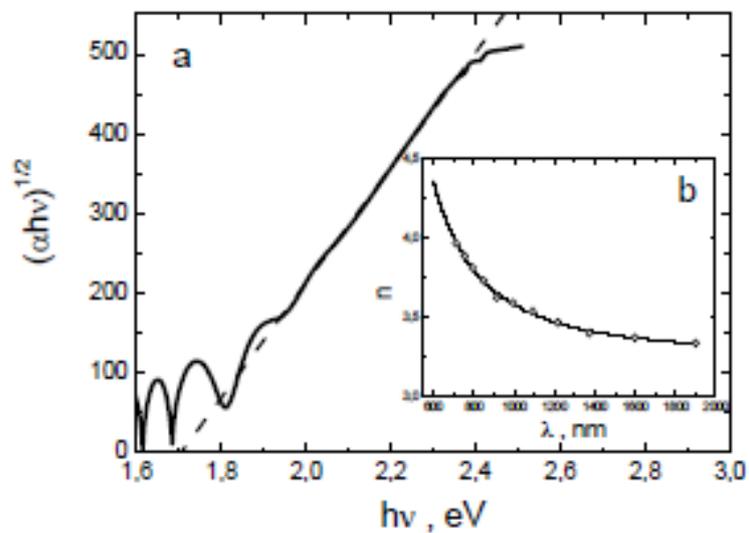


Рис.19. Определение ширины запрещенной зоны методом Тауца (а) и коэффициент поглощения пленок a-Si:H

Для определения коротковолнового поглощения используется также метод двух касательных, который представлен на рис. 20.

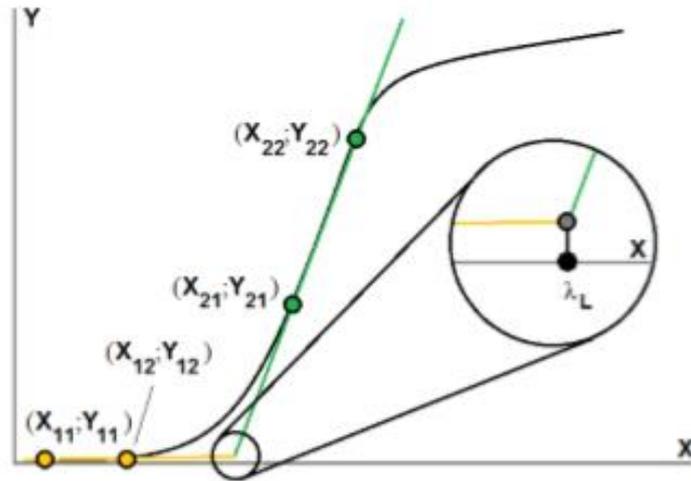


Рис. 20. Метод двух касательных для определения коротковолнового поглощения

Метод двух касательных заключается в экстраполяции двух линейных участков спектра до точки их пересечения, абсцисса которой и есть коротковолновый край поглощения. «Горизонтальные» $Y_i(X)$ и «вертикальные» $Y_r(X)$ аппроксимирующие кривые можно описать следующим уравнением (см. рис. 20):

$$Y_i = \frac{(Y_{12} - Y_{11})(X - X_{11})}{X_{12} - X_{11}} + Y_{11} \quad (4.129)$$

$$Y_r = \frac{(Y_{22} - Y_{21})(X - X_{21})}{X_{22} - X_{21}} + Y_{21} \quad (4.130)$$

где X – переменная в виде массива длин волн, экспортированного из спектра, нм.

Значение E_g можно определить с помощью зависимости $d\{\ln(\alpha h\nu)\}/d(h\nu)$ от $h\nu$. Из формулы (2.13) видно, что

$$\frac{d\{\ln(\alpha h\nu)\}}{d(h\nu)} = \frac{r}{(h\nu - E_g)} \quad (4.131)$$

Теоретически зависимость $d\{\ln(\alpha h\nu)\}/d(h\nu)$ от $h\nu$ при $h\nu = E_g$ должна иметь разрыв. В действительности за значение энергии запрещенной зоны (E_g) можно принимать то значение $h\nu$, при котором упомянутая зависимость принимает максимальное значение.

Для того чтобы построить график $d\{\ln(\alpha h\nu)\}/d(h\nu)$ от $h\nu$, сначала экспериментально полученная зависимость $\ln(\alpha h\nu) = f(h\nu)$ с весьма высокой точностью должна быть аппроксимирована многочленом девятой степени, по которому

необходимо вычислить $d\{\ln(\alpha hv)\}/d(hv)$ и построить график зависимости $d\{\ln(\alpha hv)\}/d(hv)$ от hv .

Данный метод интересен тем, что по виду зависимости $d\{\ln(hv)\}/d(hv)$ от hv можно косвенно судить о структуре пленок.

На рис. 21 приведены несколько примеров зависимости $d\{\ln(hv)\}/d(hv)$ от hv . Если максимумы на зависимостях выражены слабо, то это может свидетельствовать о начальном этапе образования нанокристаллов. Об уменьшении концентрации дефектов и, следовательно, поглощения, связанного с этими дефектами, свидетельствует увеличение данных максимумов.

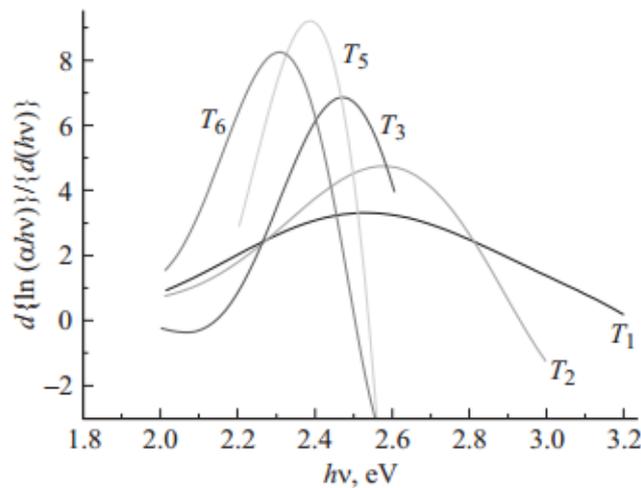


Рис 21. Зависимость $d\{\ln(\alpha hv)\}/d(hv)$ от энергии падающего фотона

В работе А. Mallikarjuna ширину запрещенной зоны определяли по графику $\log(\alpha hv)$ от $\log(hv)$ (рис. 22).

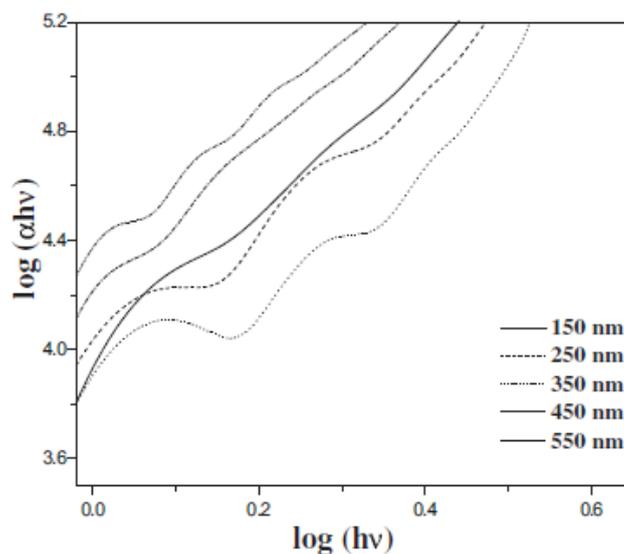


Рис 22. Зависимость $\log(\alpha hv)$ от $\log(hv)$

Согласно данной работы, в зависимости от толщины пленок ширина запрещенной зоны менялась от 3.81 до 4.27 эВ.

Для аморфных полупроводников на краю полосы фундаментального поглощения имеется экспоненциальный спад (так называемый «хвост Урбаха» или область Урбаха), в отличие от кристаллических полупроводников, имеющих более резкий край полосы поглощения (рис. 23).

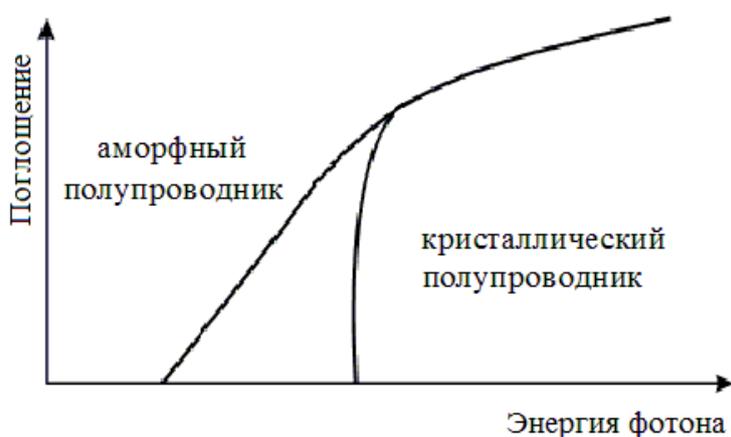


Рис. 23. Форма края полосы фундаментального поглощения аморфного и кристаллического полупроводника

«Хвосты Урбаха» известны и в кристаллических галогенидах щелочных металлов, CdS, тригональном селене и т. д. Для объяснения такой экспоненциальной зависимости в литературе встречается описание нескольких механизмов: вариации ширины запрещенной щели, обусловленное флуктуациями плотности, а также расширение края зоны, индуцированное внутренними электрическими полями. Имеется предположение, что край поглощения отражает появление хвостов состояний в щели вследствие флуктуации углов и длин связей. Возможно также, что причиной появления хвоста являются электронные переходы между локализованными состояниями в хвостах краев зон, а плотность таких состояний экспоненциально падает с энергией фотона. Есть указание на существование корреляций между наклоном «хвоста» Урбаха и координационным числом или валентностью. Предполагается, что материалы с более слабой координацией (более высокой валентностью) легче формируют идеальную аморфную сетку с меньшим количеством дефектов и пустот.

В настоящее время создан ряд теорий и моделей, позволяющих провести теоретический анализ распределения электронных состояний в аморфных полупроводниках. Из них наиболее часто используются модели Мотта-Дэвиса и Коэна-Фриче-Овчинского. Обе модели основаны на представлении о локализации состояний в зонных хвостах (рис. 24).

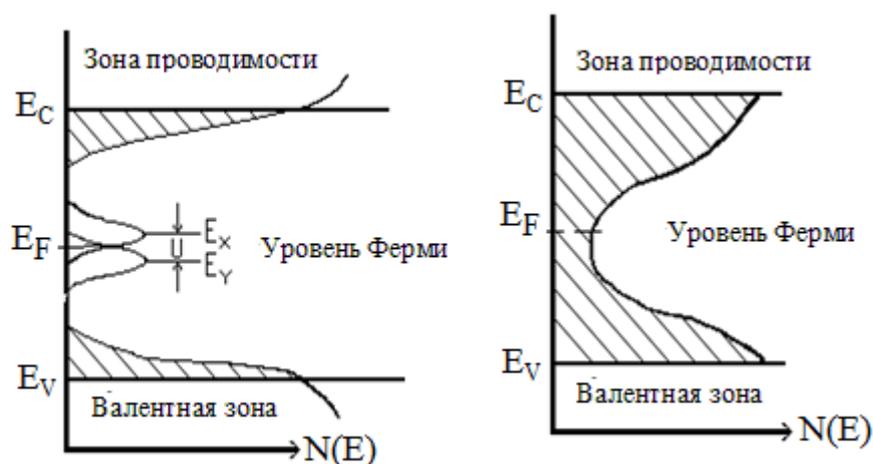


Рис. 24. Различные виды плотности электронных состояний в аморфных полупроводниках: а – модель Мота-Дэвиса; б – модель Коэна-Фрицше- Овшинского

Модель Мотта-Дэвиса предполагает, что хвосты локализованных состояний узкие и распространяются в запрещенную зону на несколько десятых электронвольта. Кроме того, вблизи запрещенной зоны предполагается наличие зоны компенсированных уровней, обязанной своим существованием дефектам в случайной сетке атомов. Постулируется существование «краев подвижности носителей». Края подвижности отделяют делокализованные состояния от локализованных состояний в «хвостах». Вид «хвостов» плотности электронных состояний определяется величиной и характером отклонений от идеальной периодичности – степенью и характером вариационности ближнего порядка некристаллического и, в частности, стеклообразного вещества.

В модели Коэна-Фрицше-Овшинского принимается, что хвосты плотности состояний перекрывают всю запрещенную зону и зависимость плотности состояний от энергий непрерывна.

E_g является минимальной энергией переходов зона-зона. Обычно значение E_g определяется по краю полосы фундаментального поглощения. Наличие хвоста в спектре поглощения создает трудности в экспериментальном определении края поглощения аморфного полупроводника.

В области Урбаха спектр поглощения описывается экспоненциальной функцией:

$$\alpha = \alpha_0 \exp - \left(\frac{E_g - h\nu}{E_0} \right) \quad (4.131)$$

Здесь E_0 – характеристическая энергия Урбаха, характеризует крутизну края и несет информацию о среднеквадратичном отклонении межатомных расстояний в стеклообразных материалах. То есть α_0 – значение коэффициента по-

глощения, экстраполированное к ширине запрещенной зоны, а E_0 – постоянная, которую можно рассматривать как меру разупорядочения материала (мэВ).

Иногда для области энергий меньших E_g используют выражение

$$\alpha = \alpha_0 \exp\left(\frac{\sigma(E-E_0)}{k_B T}\right) \quad (4.132)$$

$E = \hbar\omega$ – энергия фотона излучения;

α_0 – коэффициент поглощения при значении энергии $E = E_0$;

k_B – постоянная Больцмана;

T – рабочая температура;

$\frac{\sigma}{k_B T}$ – наклон Урбаха, который характеризует степень крутизны зависимости коэффициента поглощения и зависит от параметров материала.

На рис. 25 показана типичная зависимость коэффициента однофотонного поглощения α от энергии фотона $h\nu$ вблизи края полосы фундаментального поглощения стекол.

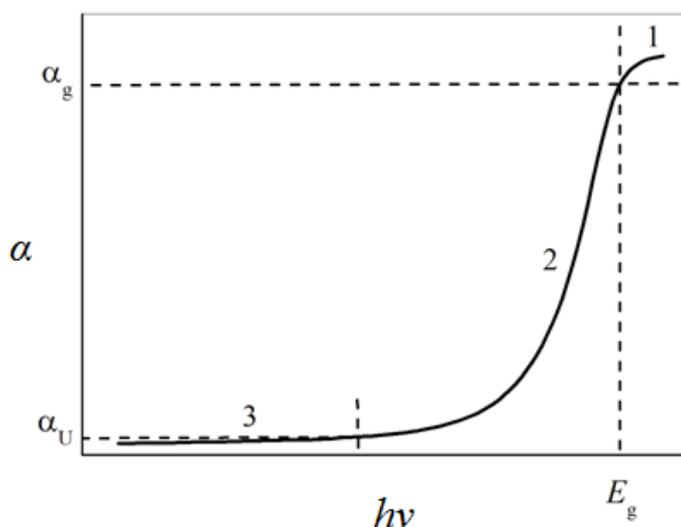


Рис. 25. Край полосы фундаментального поглощения халькогенидных стекол:

1 – область Тауца; 2 – область Урбаха; 3 – область слабого поглощения.

В первой области $\alpha \geq 10^4 \text{ см}^{-1}$

Для примера на рис. 26 представлен расчетный спектр коэффициента поглощения аморфной тонкой пленки $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, представленный в работе С.А. Козюхина.

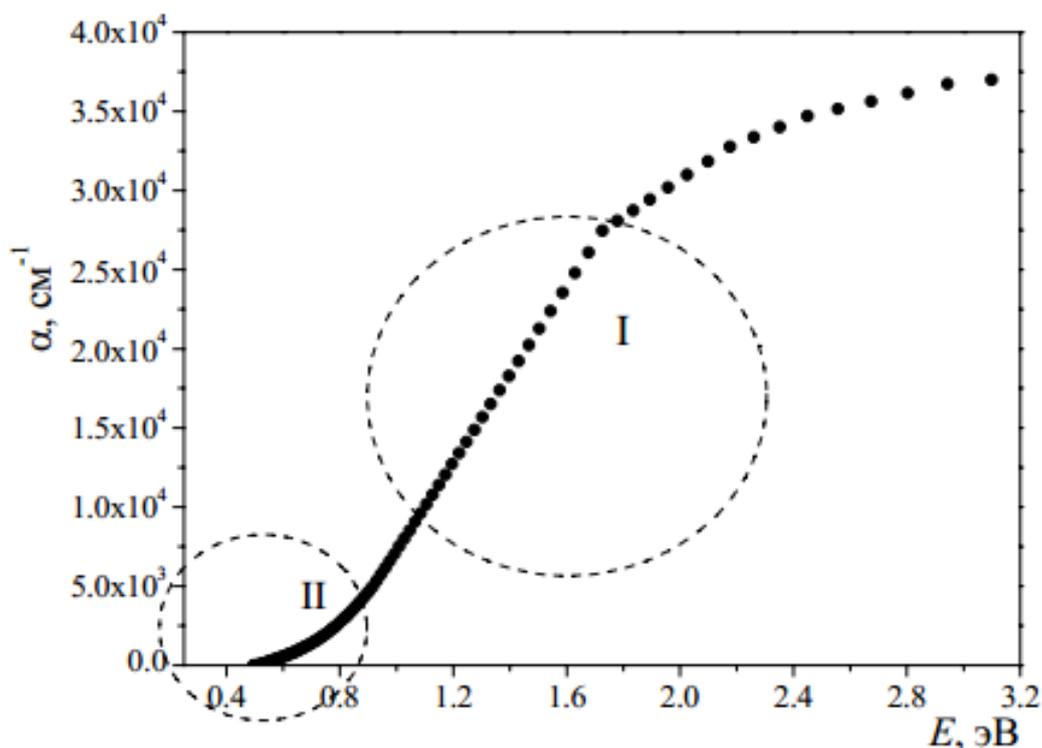


Рис. 26. Расчетный спектр коэффициента поглощения аморфной тонкой пленки $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ [работа С.А. Козюхина]

Расчетный спектр коэффициента поглощения (рис. 26) имеет две характерные области: в области энергий фотонов больше 0.61 эВ (см. область I) спектр хорошо описывается параболической моделью Тауца. При энергиях фотонов меньше 0.61 эВ наблюдается «хвост» Убраха, который соответствует экспоненциальному закону (см. область II).

Для определения оптической ширины запрещенной зоны по спектрам поглощения в данной работе в соответствии с моделью Тауца $B(\hbar\omega - E_g)^2$ были построены зависимости $(\alpha\hbar\omega)^{1/2} = f(\hbar\omega)$ (рис. 26, вставка), на которой был выделен линейный участок, затем он экстраполировался до пересечения с осью абсцисс (см. рис. 27); точка пересечения прямой с осью соответствует значению $E_g = 0.61$ эВ.

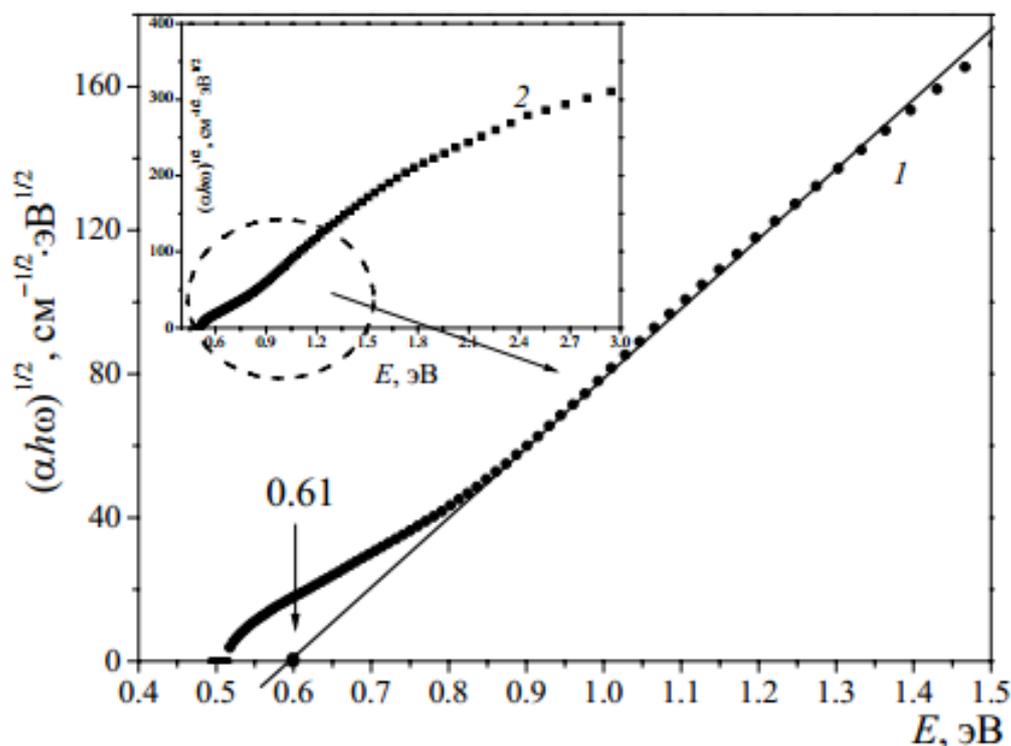


Рис. 27. Расчет E_g для аморфной тонкой пленки $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ [работа С.А. Козюхина]

Для нахождения характеристической энергии E_0 в соответствии с выражением (1), на спектре выделялся участок в области хвоста Урбаха (см. область 2 на рис. 26), который затем аппроксимировался экспоненциальной функцией (рис. 26), позволяющей получить значение энергии Урбаха $E_0=0.13$ эВ.

Иногда для каждого образца в области края полосы фундаментального поглощения строится зависимость логарифма коэффициента поглощения от энергии фотона, для примера на рис. 28 представлены зависимости логарифма коэффициента поглощения от энергии фотона для халькогенидных стекол. Линейный характер зависимости $\ln(\alpha)$ в некоторой области энергий фотона подтверждает экспоненциальный характер зависимости $\alpha(h\nu)$ в области Урбаха.

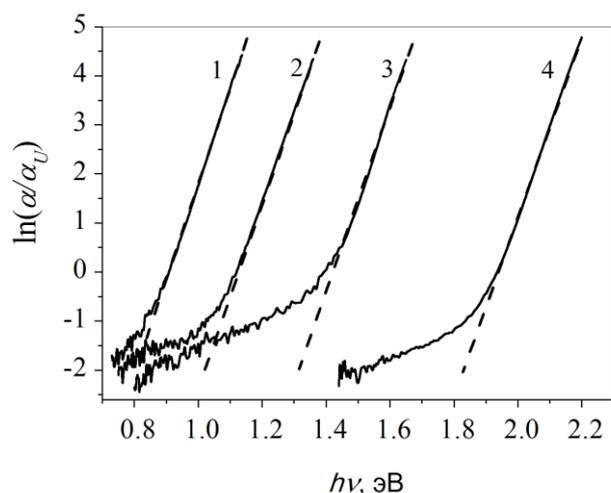


Рис. 28. Логарифм коэффициента поглощения в зависимости от энергии фотона для образцов халькогенидного стекла:

$As_{30}Se_{50}Te_{20}$ (1), $As_{30}Se_{60}Te_{10}$ (2), $As_{40}Se_{60}$ (3), $As_{40}S_{60}$ (4)

[работа Кузюткиной Ю. С.]

Энергия Урбаха E_0 определяется по наклону прямолинейных участков зависимости $\ln(\alpha) = f(h\nu)$. Вначале рассчитываются производные $S(h\nu) = d(\ln(\alpha))/d(h\nu)$ в области Урбаха и строятся в зависимости от $h\nu$ (рис. 29). Если бы зависимость $\alpha(h\nu)$ была строго экспоненциальной, то эти производные имели бы постоянные значения, так что $S^{-1} = E_0$. Однако, на рис. 29 видны вариации функции $1/S(h\nu)$ в области Урбаха. Это означает, что функция $\alpha(h\nu)$ не является строго экспоненциальной.

Для получения приближенных значений E_0 в работе Кузюткиной Ю. С. проводится аппроксимация зависимости $\ln(\alpha(h\nu))$ прямыми линиями (пунктирные линии на рис. 29) и рассчитывается наклон этих линий. Полученные значения E_0 показаны на рис. 29 пунктирными линиями. Согласно автора, ошибка этого приближения не превышает 10 %. Рост функции $1/S(h\nu)$ на краях рассмотренных областей при увеличении энергии фотона происходит из-за уменьшения точности измерений спектров пропускания и отражения при приближении к порогу чувствительности фотодетектора.

Наиболее просто определение характеристической энергии Урбаха E_0 по графику зависимости $\alpha = f(\hbar\omega)$ в полулогарифмическом масштабе. В области хвоста Урбаха зависимость принимает вид

$$\lg \alpha = f(\hbar\omega) = \lg \alpha_0 + \frac{\hbar\omega - E_g}{E_0} \quad (4.133)$$

Это позволяет найти E_0 по углу наклона линейного участка.

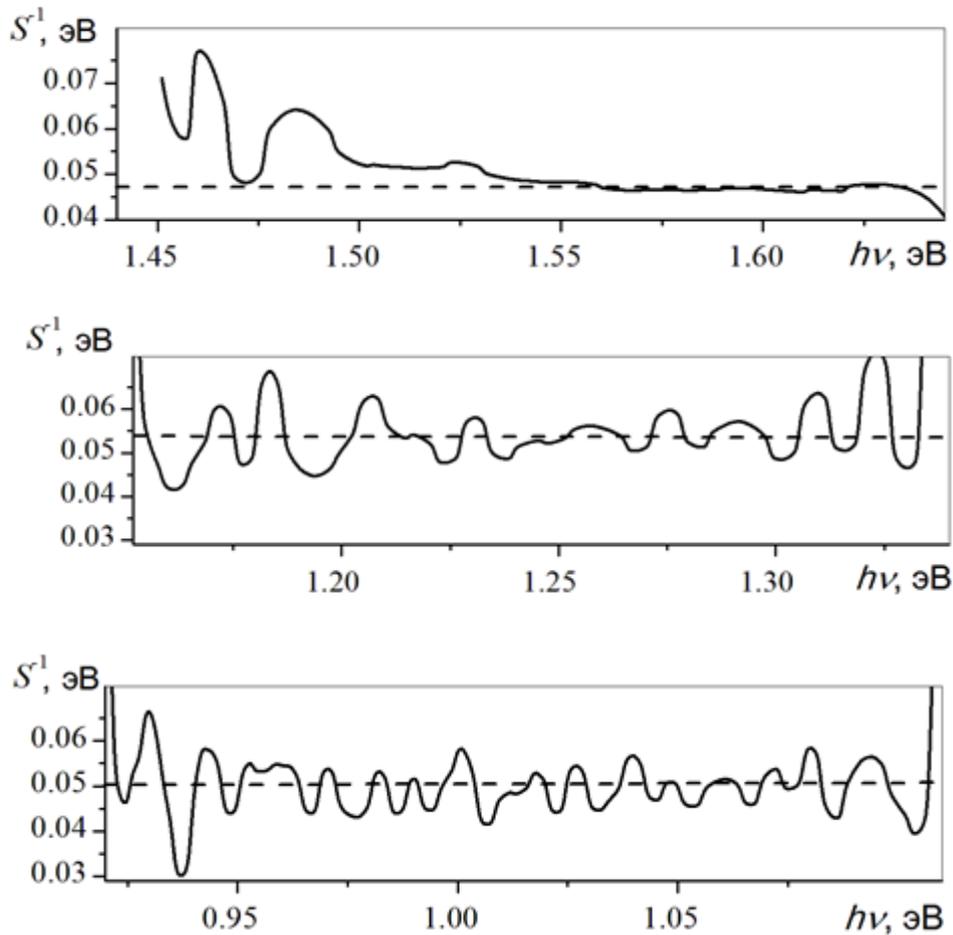


Рис. 29. Функция $1/S(h\nu)$ в зависимости от энергии фотона (сплошная линия) и значение характеристической энергии E_0 (пунктирная линия) для образцов $As_{40}S_{60}$ (а), $As_{40}Se_{60}$ (б), $As_{30}Se_{60}Te_{10}$ (в), $As_{30}Se_{50}Te_{20}$ (г).)
[работа Кузюткиной Ю. С]

Есть уравнение, позволяющее определить эффективную концентрацию заряженных дефектов N_t :

$$E_0 = 2/2W_B(N_t a_B^3)^{2/5} \tag{4.134}$$

где

$$W_B = e^2/2\varepsilon a_B,;$$

a_B – боровский радиус в веществе;

ε – диэлектрическая проницаемость.

5. ЗАДАНИЯ И КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

Задание 1

Для проверки точности представленной теории постройте спектры пропускания и отражения и их огибающие для системы пленка-подложка с заданными параметрами по формулам 4 раздела. Параметры системы либо задает преподаватель, либо по умолчанию можно использовать представленные ниже.

Увеличьте или уменьшите толщину пленок. Проанализируйте изменение спектра. Измените значение показателя преломления пленки. Проанализируйте изменение спектра. Измените значение показателя поглощения пленки. Проанализируйте изменение спектра.

Параметры системы пленка-подложка по умолчанию

$$s=1.51 \text{ (cons),}$$

$$d=1000\text{nm,}$$

$$n = \frac{3 \cdot 10^3}{\lambda^2} + 2.6$$

$$\lg \alpha = \frac{1.5 \cdot 10^6}{\lambda^2} - 8 \quad (\alpha \text{ nm}^{-1})$$

Задание 2

Определить показатель преломления пленки, толщину и показатель поглощения. Сравнить теоретические (заданные вначале) и полученные значения. Вычислить функцию невязки.

Задание 3

Получить у преподавателя экспериментальный спектр пропускания тонкой пленки на подложке. Определить показатель преломления пленки, толщину и показатель поглощения. Сравнить теоретический и экспериментальный спектры пропускания. Вычислить функцию невязки. Функция невязки должна стремиться к нулю. Если спектры не совпадают, то необходимо уточнить значения $n(\lambda)$, $\alpha(\lambda)$, $k(\lambda)$ и d .

Постройте графики зависимостей $n(\lambda)$, $\alpha(\lambda)$, $k(\lambda)$.

Приведите значения главных показателей преломления, коэффициента дисперсии (число Аббе), средней дисперсии, частной дисперсии и относительной частной дисперсии.

Примечание

В оптическом материаловедении наиболее значимые следующие длины волн: 546,0740 nm (e); 587,5618 nm (d); 589,2939 nm (D); 643,8469 nm (C'); 656,2725 nm (C); 852,110 nm (s); 365,0146 nm (i); 404,6561 nm (h); 435,8343 nm (g); 479,9914 nm (F'); 496,1327 nm (F).

Часто приводятся значения главных показателей преломления на линиях спектра $546,0740\text{nm}$ (e) или $587,5618\text{nm}$ (d) – n_e или n_d , соответственно;

Коэффициент дисперсии (число Аббе): ν_d или ν_e .

$$\nu_d = \frac{n_d - 1}{n_F - n_C} \quad \text{или} \quad \nu_e = \frac{n_d - 1}{n_{F'} - n_{C'}}$$

Средняя дисперсия $\langle \Delta n \rangle = n_F - n_C$ или $\langle \Delta n \rangle = n_{F'} - n_{C'}$

Частная дисперсия $n_g - n_{F'}$

Относительная частная дисперсия $\frac{n_g - n_{F'}}{n_{F'} - n_{C'}}$

Задание 4

Определите тип оптических переходов (прямозонный или непрямозонный образец) и ширину запрещенной зоны.

Контрольные вопросы

1. Какой диапазон электромагнитного излучения изучают в оптике?
2. Какую энергию имеют кванты излучения видимого излучения?
3. Какие уравнения лежат в основе взаимодействия электромагнитного излучения с веществом?
4. Какими уравнениями задаются законы распространения электромагнитных волн?
5. Какими механизмами поглощения объясняется наличие полос поглощения вблизи основной полосы?
6. Дайте определение экситона. Какие модели экситона существуют?
7. Создает ли ток движение экситона?
8. Сколько уравнений выделил Максвелл?
9. Сколько уравнений Максвелла содержится в современной форме (после работ Хевисайда, Герца и Гиббса)?
10. Чем обусловлено ограничение метода огибающих?
11. В чем заключается суть численных методов определения параметров пленок?
12. Какие физические ограничения на величины $n(\lambda)$, $k(\lambda)$ вводятся для получения решения, имеющего физический смысл?
13. Какое из уравнений Максвелла является обобщенным законом электромагнитной индукции: с переменным магнитным полем неразрывно связано вихревое индуцируемое электрическое поле.
14. Какое из уравнений Максвелла является обобщенным законом полного тока?
15. В чем суть обобщенного закона полного тока?
16. Какие уравнения учитывают макроскопические характеристики среды?

17. В каком случае уравнения Максвелла справедливы и когда они теряют смысл?

18. Что необходимо учитывать для расчета полей в кусочно-непрерывных средах?

19. За что отвечает показатель преломления? За что отвечает показатель поглощения? Из какого выражения это следует?

20. Какие величины описывают взаимодействие излучения с однородной средой?

21. Какие механизмы поглощения Вы знаете?

22. Какую величину достигает абсолютное значение коэффициентов поглощения при собственном поглощении?

23. Что необходимо учитывать при изучении собственного поглощения полупроводника?

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ефимова, А. И. Инфракрасная спектроскопия систем пониженной размерности : учебное пособие / А. И. Ефимова, Л. А. Головань, П. К. Кашкаров [и др.]. – Санкт-Петербург : Лань, 2016. – 246 с.
2. Толстой, В. П. Введение в оптическую абсорбционную спектроскопию наноразмерных материалов. – Санкт-Петербург : СОЛО, 2014. – 187 с.
3. Ефимов, А. М. Оптические свойства материалов и механизмы их формирования. – Санкт-Петербург : СПбГУИТМО, 2008. – 103 с.
4. Уханов, Ю. И. Оптические свойства полупроводников. – Москва : Наука, 1977. – 367 с.
5. Либенсон, М. Н. Взаимодействие лазерного излучения с веществом (силовая оптика). Часть I. Поглощение лазерного излучения в твердых телах : учебное пособие / М. Н. Либенсон, Е. Б. Яковлев, Г. Д. Шандыбина ; под общей редакцией В. П. Вейко. – 2-е изд., перераб. и доп. – Санкт-Петербург : Университет ИТМО, 2015. – 130 с.
6. Забелина, Е. В. Многоугловые спектрофотометрические методы отражения для определения коэффициентов преломления / Е. В. Забелина, Н. С. Козлова, Ж. А. Гореева, В. М. Касимова // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2019. – Т. 22, № 3. – С. 168–177.
7. Наджафов, Б. А. Определение оптических констант в тонких пленках a-Si:H и a-nk-C:H / Б. А. Наджафов // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2016. – № 12. – С. 1613–1617.
8. Manificier, J. C. A simple method for the determination of the optical constants n , h and the thickness of a weakly absorbing thin film / J. C. Manificier, J. Gasiot, J. P. Fillard // Journal of Physics E: Scientific Instruments. – 1976. – Vol. 9. – P. 1002-1004.
9. Swanepoel, R. Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon / R. Swanepoel // J. Phys. E: Sci. Instrum. – 1983. – Vol. 16. – P. 1214–1222.
10. Jenkins, F. A. Fundamentals of Optics / F. A. Jenkins, H. E. White. – Auckland : McGraw-Hill, 1981. – P. 482–486.
11. Tatian, B. Aberration balancing for tilted mirrors in pushbroom systems / B. Tatian // Appl. Opt. – 1984. – Vol. 23. – P. 4477–4485.
12. Hecht, E. Optics / E. Hecht. – 2nd ed. – Reading MA : Addison-Wesley, 1990. – P. 61.
13. Poelman, D. Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements: a critical review / D. Poelman, P. F. Smet // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2003. – Vol. 36. – P. 1850–1857.
14. Корнеева, М. Д. Расчёт показателя преломления эпитаксиальных слоёв КРТ / М. Д. Корнеева, В. В. Сало, А. В. Никонов, К. О. Болтарь, Н. И. Яковлева // Прикладная физика. – 2013. – № 6. – С. 48–53.

15. Нгуен, Х. Ф. Влияние висмута на оптические свойства тонких пленок $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ / Х. Ф. Нгуен, С. А. Козюхин, А. Б. Певцов // Физика и техника полупроводников. – 2014. – Т. 48, вып. 5. – С. 597–603.
16. Каталог оптического бесцветного неорганического стекла. – Москва : В/О Машприборинторг, Vebjena er Glaswerkschott & Gen, Jena, [б. г.].
17. Гончаров, А. А. Синтез нанокристаллических пленок диоксида титана в цилиндрическом газовом разряде магнетронного типа и их оптическая характеристика / А. А. Гончаров, А. Н. Евсюков, Е. Г. Костин [и др.] // Журнал технической физики. – 2010. – Т. 80, вып. 8. – С. 127–135.
18. Нгуен, Х. Ф. Влияние висмута на оптические свойства тонких пленок $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ / Х. Ф. Нгуен, С. А. Козюхин, А. Б. Певцов // Физика и техника полупроводников. – 2014. – Т. 48, вып. 5. – С. 597–03.
19. Малькин, А. А. Разработка методики проектирования оптических систем с использованием ограниченного набора марок стекол : автореферат дис. ... канд. техн. наук / Малькин А.А. – Москва, 2015. – 24 с.
20. Fujiwara, H. Spectroscopic Ellipsometry Principles and Applications / H. Fujiwara. – John Wiley & Sons Ltd, 2007.
21. Poelman, D. Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements: a critical review / D. Poelman, P. F. Smet // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2003. – Vol. 36. – P. 1850–1857.
22. Birgin, E. G. Estimation of the optical constants and the thickness of thin films using unconstrained optimization / E. G. Birgin, I. Chambouleyron, J. M. Martínez. – [Б. м.], [б. г.]. – Subject classification: AMS 65K, PACS 78.65.-s.
23. Новикова, Ю. А. Исследование оптических констант пленок фторидов в средней ИК области спектра и синтез на их основе ахроматических просветляющих покрытий : диссертация ... кандидата физико-математических наук / Новикова Ю. А. – Санкт-Петербург, 2015. – 157 с.
24. Mallikarjuna Reddy, Properties of nickel oxide thin films deposited by dc reactive magnetron sputtering / Mallikarjuna Reddy, A. Sivasankar Reddy, P. Sreedhara Reddy // Vacuum. – 2011. – Vol. 85. – P. 949–954.
25. Яковлева, Н. И. Особенности спектральных зависимостей поглощения в структурах A_3B_5 и A_2B_6 / Н. И. Яковлева, А. В. Никонов // Успехи прикладной физики. – 2016. – Т. 4, № 4. – С. 394–402.
26. Джалилов, Н. З. Поглощение и спектры оптических параметров в аморфных твердых растворах системы Se-S / Н. З. Джалилов, Г. М. Дамиров // Фотоэлектроника. – 2011. – Т. 45, вып. 4. – С. 500–505.
27. Bhattacharjee, B. Composition dependence of optical band gap and refractive index in amorphous $\text{Ge}_x\text{Se}_{100-x}$ thin films / B. Bhattacharjee, C. H. Hsu, C. H. Lu, R. C. Ruan // Chalco-gen. Lett. – 2010. – Vol. 7. – P. 71–81.
28. Ganjoo, A. Computer program PARAV for calculating optical constants of thin films and bulk materials: Case study of amorphous semiconductors / A. Ganjoo, R. Golovchak // Journal of optoelectronics and advanced materials. – 2008. – Vol. 10, № 6. – P. 1328–1332.

29. Петросян, П. Г. Исследование поведения структурных дефектов в нанокристаллах $CdSexS_{1-x}$ / П. Г. Петросян, Л. Н. Григорян // Журнал технической физики. – 2017. – Т. 87, вып. 3. – С. 443–447.
30. Кузюткина, Ю. С. Особенности нелинейного оптического отклика в халькогенидных стеклах вблизи края полосы фундаментального поглощения : дис. ... к.ф.-м.н. / Кузюткина Ю. С. – Саратов, 2015. – 141 с.
31. Козюхин, С. А. Оптические свойства аморфных тонких пленок материалов фазовой памяти $Ge-Sb-Te$ / С. А. Козюхин, К. Д. Цэндин, Х. Ф. Нгуен, В. В. Козик // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2014. – Т. 57, № 2. – С. 67–73.
32. Шапиро, И. С. К истории открытия уравнений Максвелла / И. С. Шапиро // Успехи физических наук. – 1972. – Т. 108, вып. 2. – С. 319–333.
33. Кулак, А. И. Оптические свойства пленок диоксида титана с различным содержанием углерода / А. И. Кулак, С. А. Анараки, Н. В. Гапоненко [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. – 2017. – Т. 84, № 1. – С. 150.
34. Уханов, Ю. И. Оптические свойства полупроводников. – Москва : Наука, 1977. – 368 с.
35. Kim, Y. H. Effects of substrate temperature and Zn addition on the properties of Al-doped ZnO films prepared by magnetron sputtering / Y. H. Kim, K. S. Lee, T. S. Lee [et al.] // Appl. Surf. Science. – 2009. – Vol. 255. – P. 7251.
36. Lee, S. H. Characteristics of hydrogen co-doped ZnO : Al thin films / S. H. Lee, T. S. Lee, K. S. Lee [et al.] // J. Phys. D. – 2008. – Vol. 41. – P. 095303.
37. Новодворский, О. А. Изменение свойств пленок Ag_2S при фотостимулированном растворении в аморфном As_2S_3 / О. А. Новодворский, Л. С. Горбатенко, В. Я. Панченко // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43, № 4. – С. 439.
38. Пигур, О. Н. Влияние обработки водородом монокристаллов теллурида кадмия на их спектры пропускания / О. Н. Пигур, В. Д. Попович, R. Potera, И. С. Вирт, З. Ф. Цибрий (Ивасив) // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2011. – № 4. – С. 35–38.
39. Palik, Edward D. Handbook of optical constants of solids / Edward D. Palik. – Academic Press, 1988. – P. 230.
40. Расулов, Д. Т. Оптические свойства полупроводниковых пленок селенида меди и индия / Д. Т. Расулов, У. Д. Расулов, М. С. Усмонов // Конференция посвященная 90-летию академика С.А.Азимова, г. Ташкент, 18–19 ноября 2004 г. – Ташкент, 2004. – С. 336–340.
41. Рефахати, Н. Влияние неоднородности химического состава на спектральное положение края фундаментального поглощения твердых растворов $Cu(In,Ga)Se_2$ / Н. Рефахати, А. В. Мудрый, В. Д. Живулько, М. В. Якушев, R. Martin // Журнал прикладной спектроскопии. – 2014. – Т. 81, № 3. – С. 383–390.
42. Косяченко, Л. А. Ширина запрещенной зоны кристаллов $CdTe$ и $Cd_{0.9}Zn_{0.1}Te$ / Л. А. Косяченко, В. М. Склярчук, О. В. Склярчук, О. Л. Масляничук // Физика и техника полупроводников. – 2011. – Т. 45, вып. 10. – С. 1323–1329.

43. Стаськов, Н. И. Оптические характеристики пленок титаната стронция, полученных золь-гель методом / Н. И. Стаськов, А. Б. Сотский, Л. И. Сотская [и др.] // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 125, вып. 4. – С. 473–478.
44. Брус, В. В. Оптические свойства тонких пленок $\text{TiO}_2\text{-MnO}_2$, изготовленных по методу электронно-лучевого испарения / В. В. Брус, Д. Ковалюк, П. Д. Марьянчук // Журнал технической физики. – 2012. – Т. 82, вып. 8. – С. 110–113.
45. Ganjoo, A. Computer program PARAV for calculating optical constants of thin films and bulk materials: Case study of amorphous semiconductors / A. Ganjoo, R. Golovchak // Journal of optoelectronics and advanced materials. – 2008. – Vol. 10, № 6. – P. 1328–1332.
46. Ilican, S. Determination of the thickness and optical constants of transparent indium-doped ZnO thin films by the envelope method / S. Ilican, M. Caglar, Y. Caglar // Materials Science-Poland. – 2007. – Vol. 25, № 3. – P. 709–718.
47. Tan, W. C. Optical Properties of Amorphous Selenium Films : A Thesis Submitted to the College of Graduate Studies and Research In Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Master of Science In the Department of Electrical Engineering University of Saskatchewan / W. C. Tan. – Saskatoon, Saskatchewan, 2006. – 143 p.
48. Brodsky, M. H. Absorption edge and optical gaps of amorphous germanium / M. H. Brodsky, M. Cardona, J. J. Cuomo // Phys. Rev. B. – 1977. – Vol. 16. – P. 3556.
49. Abbas, S. I. Optical properties of CdS thin films deposited by thermal evaporation technique / S. I. Abbas, A. Q. Ubaid // Journal of Advances in Physics. – 2014. – Vol. 6. – P. 1016.
50. Kim, Y. H. Effects of substrate temperature and Zn addition on the properties of Al-doped ZnO films prepared by magnetron sputtering / Y. H. Kim, K. S. Lee, T. S. Lee [et al.] // Applied Surface Science. – 2009. – Vol. 255. – P. 7251–7256. – DOI: 10.1016/j.apsusc.2009.03.075
51. Lee, S. H. Characteristics of hydrogen co-doped ZnO : Al thin films / S. H. Lee, T. S. Lee, K. S. Lee [et al.] // J. Phys. D. – 2008. – Vol. 41. – P. 095303. – DOI: 10.1088/0022-3727/41/9/095303
52. Ельцина, О. С. Оптические постоянные тонких пленок наночастиц кремния, полученных методом лазерного электродиспергирования / О. С. Ельцина, Д. А. Андроников, М. Ю. Семерухин [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2013. – Т. 47, № 10. – С. 1376–1380.

Учебное издание

Федотова Ирина Витальевна
Крылов Петр Николаевич

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ

Учебно-методическое пособие

Авторская редакция

Издательский центр «Удмуртский университет»
426034, г. Ижевск, ул. Ломоносова, 4Б, каб. 021
Тел. : + 7 (3412) 916-364, E-mail: editorial@udsu.ru