

DETERMINAREA DIN SPECTRELE DE REFLEXIE A LĂRGIMII BENZII INTERZISE A COMPUȘILOR SEMICONDUCTORI DE TIP ZnS_xSe_{1-x}

Mihail POPA dr., conf. univ.,
Universitatea de Stat „Alec Russo” din Bălți

Summary: Spectroscopic technique is very useful for characterising semiconducting materials. We demonstrate here a new method for determination the energy band gap of thin films from reflectance data.

Key-words: reflection spectrum, absorption spectrum, a semiconductor band gap width, spectrophotometer.

I. Introducere

În ultimii ani se manifestă un interes deosebit privind studiul proprietăților fizice ale straturilor subțiri semiconductoare pentru utilizarea acestora în diverse dispozitive optoelectronice [1]. Pentru acest studiu este necesară cunoașterea caracteristicilor structurale ale materialului semiconductor. În acest articol voi prezenta o metodă relativ nouă de determinare a lărgimii benzii interzise din spectrele de reflexie ale straturilor subțiri semiconductoare [2].

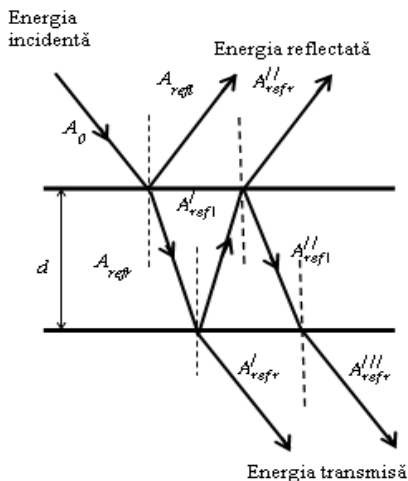


Fig. 1. Reprezentarea fenomenelor de reflexie și transmisie într-un strat subțire

II. Considerații teoretice

Coeficientul de reflexie la interfață se definește ca raportul dintre energia reflectată și energia incidentă. Fie că I_0 este intensitatea incidentă a luminii ce cade pe suprafața stratului subțire de grosime d , termenii r_1 , r_2 și r_3 sunt coeficienții de reflexie din față, din interior și din spatele probei. În Fig. 1 se arată că dacă lumina cade sub un unghi mic de incidență (de circa 5°), o parte din ea se reflectă înapoi în același mediu (aer), o altă parte se reflectă în interiorul stratului subțire, iar cea de-a treia parte se transmite în mediul al treilea.

Fie A_0 amplitudinea razei incidente, iar amplitudinile razei reflectate și refractate de la suprafață sunt date de expresiile

$$A_{refl} = A_0 r_1 \exp\left(\frac{-j\pi}{2}\right), \quad (1)$$

$$A_{refr} = A_0 (1 - r_1) \cdot \exp[-(\alpha + j\beta)d] \quad (2)$$

unde α este coeficientul de absorbție, β este factorul de fază, iar d este grosimea stratului subțire.

Raza refractată de la suprafața de separație a mediilor I și II (Fig. 1) trece prin stratul subțire și apoi se reflectă la interfață (suprafața de separație interioară) dintre mediile II și III. Amplitudinea unei reflectate în interiorul stratului subțire este dată de relația

$$A_{refr}^I = A_0 (1 - r_1) r_2 \cdot \exp[-(\alpha + j\beta)d] \cdot \exp\left(-\frac{j\pi}{2}\right). \quad (3)$$

Această rază parcurge din nou stratul subțire și la interfața mediilor II și I o parte din ea se reflectă, iar o altă parte se refractă. Amplitudinile razelor reflectate și refractate sunt:

$$A_{refl}^{II} = A_0 (1 - r_1) r_2 r_3 \cdot \exp[-2(\alpha + j\beta)d] \cdot \exp\left(-\frac{j\pi}{2}\right), \quad (4)$$

$$A_{refr}^{II} = A_0 (1 - r_1) r_2 (1 - r_3) \cdot \exp[-2(\alpha + j\beta)d] \cdot \exp\left(-\frac{j\pi}{2}\right). \quad (5)$$

Neglijând reflexiile ulterioare, am obținut că amplitudinea rezultantă a razei reflectate

$$A = A_{refl} + A_{refr}^{II} \quad (6)$$

sau

$$A = A_0 r_1 \exp\left(-\frac{j\pi}{2}\right) + A_0 (1 - r_1) r_2 (1 - r_3) \cdot \exp[-2(\alpha + j\beta)d] \cdot \exp\left(-\frac{j\pi}{2}\right), \quad (7)$$

sau

$$A = A_0 \cdot \exp\left(-\frac{j\pi}{2}\right) [r_1 + (1 - r_1) r_2 (1 - r_3) \cdot \exp[-2(\alpha + j\beta)d]]. \quad (8)$$

Analog, obținem

$$A^* = A_0 \cdot \exp\left(+\frac{j\pi}{2}\right) [r_1 + (1 - r_1) r_2 (1 - r_3) \cdot \exp[-2(\alpha - j\beta)d]]. \quad (9)$$

Prin urmare, intensitatea fascicului reflectat

$$I = A \cdot A^* = A_0^2 [A + B \exp[-2(\alpha + j\beta)d]] \cdot [A + B \exp[-2(\alpha - j\beta)d]], \quad (10)$$

unde $A = r_1$ și $B = (1 - r_1) r_2 (1 - r_3)$. Deschidem parantezele pătrate ale relației (10) și obținem:

$$I = A_0^2 [A^2 + AB \exp(-2(\alpha + j\beta)d) + AB \exp(-2(\alpha - j\beta)d) + B^2 \exp[-4\alpha d]]. \quad (11)$$

sau

$$I = I_0 [A^2 + 2AB \cos(2\beta d) \exp(-2\alpha d) + B^2 \exp[-4\alpha d]]. \quad (12)$$

Folosind alte notații putem scrie

$$I = I_1 + I_2 \exp(-2\alpha d) + I_3 \exp(-4\alpha d), \quad (13)$$

unde $I_1 = I_0 A^2 = I_0 r_1^2$, $I_2 = 2AB I_0 \cos(2\beta d) = 2I_0 r_1 (1 - r_1) r_2 (1 - r_3) \cos(2\beta d)$, iar $I_3 = I_0 B^2 = I_0 (1 - r_1)^2 r_2^2 (1 - r_3)^2$.

Pentru straturile subțiri, de grosime comparabilă cu lungimea de undă, termenul $\cos(2\beta d)$ poate fi considerat a fi constant și egal cu unitatea, deoarece pentru straturile subțiri termenul $\beta d = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) d$ este întotdeauna un multiplu lui π , și astfel $\cos(2\beta d) = 1$. Rezultă că I_2 este un termen constant. Datorită coeficientul de absorbție destul de mare, al treilea termen din ecuația (13) poate fi neglijat comparativ cu al doilea termen, și obținem

$$I = I_1 + I_2 \exp(-2\alpha d), \quad (14)$$

unde termenul I_1 reprezintă reflexia de la suprafața exterioară a stratului subțire, iar $I_2 \exp(-2\alpha d)$ – reflexia de la suprafața interioară a stratului subțire. Astfel,

$$I_1 = I_{min}. \quad (15)$$

Substituim relația (15) în (14) și putem scrie

$$I = I_{min} + I_2 \exp(-2\alpha d) \Rightarrow I - I_{min} = I_2 \exp(-2\alpha d). \quad (16)$$

Logaritmăm relația (16)

$$\ln(I - I_{min}) = \ln(I_2) - 2\alpha d \quad (17)$$

Pentru a determina termenul $\ln(I_2)$ vom considera o regiune unde $\alpha = 0$, pentru care $I = I_{max}$. Rezultă că

$$\ln(I_{max} - I_{min}) = \ln(I_2), \quad (18)$$

și substituind relația (18) în (17), obținem

$$2\alpha d = \ln\left(\frac{I_{max} - I_{min}}{I - I_{min}}\right). \quad (19)$$

Ținând cont că coeficientul de reflexie $R = I / I_0$, obținem

$$2\alpha d = \ln\left(\frac{R_{max} - R_{min}}{R - R_{min}}\right) \quad (20)$$

unde R_{max} și R_{min} sunt valorile maxime și minime în spectrul de reflexie.

Pentru materialele cu bandă interzisă directă putem scrie relația lui Tauc [1-2]:

$$\alpha h\nu = A(h\nu - E_g)^{1/2}, \quad (21)$$

unde A este o constantă care este diferită pentru diferite tranziții. Din relația (20) deducem că există o proporționalitate directă între termenul $\ln[(R_{max} - R_{min})/(R - R_{min})]$ și α . Dacă construim graficul dependenței $(\alpha h\nu)^2 = f(h\nu)$ obținem o linie dreaptă. Extrapolând această dreaptă pentru $(\alpha h\nu)^2 = 0$ putem determina lărgimea benzii interzise E_g .

În mod similar se poate construi graficul dependenței

$$\left[h\nu \cdot \ln \left(\frac{R_{max} - R_{min}}{R - R_{min}} \right) \right]^2 = f(h\nu), \quad (22)$$

și pentru valoare nulă a ordonatei $\left[h\nu \cdot \ln \left(\frac{R_{max} - R_{min}}{R - R_{min}} \right) \right]^2 \Rightarrow 0$, intersecția dreptei de extrapolare cu ordonata ne indică lărgimea benzii interzise E_g .

III. Detalii experimentale. Rezultate experimentale. Analiză

Spectrele de reflexie ale straturilor subțiri de ZnS_xSe_{1-x} au fost obținute în domeniul spectral 330-1100 nm, utilizând spectrofotometrul de tip HITACHI U-3400.

În Fig. 1 și 2 sunt reprezentate spectrul de transmisie, și respectiv, spectrul de reflexie ale straturilor subțiri de $ZnS_{0,5}Se_{0,5}$. Observăm că în domeniul lungimilor de undă 380-1080nm reflexia în straturile respective nu depășește 0,5%, transmisia este cuprinsă între 75-100%. Aceasta ne vorbește de faptul că straturile sunt transparente, iar absorbția undelor electromagnetice în straturile respective este destul de mică.

De asemenea, se constată că maximele de transmisie coincid cu minimele de reflexie, fapt ce demonstrează prezența fenomenului de interferență în straturile respective.

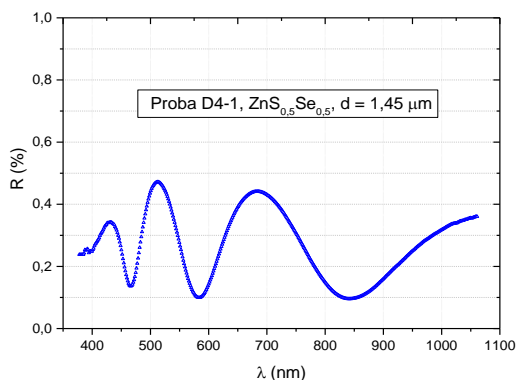


Fig. 1. Spectrul de reflexie a straturilor subțiri de $ZnS_{0,5}Se_{0,5}$

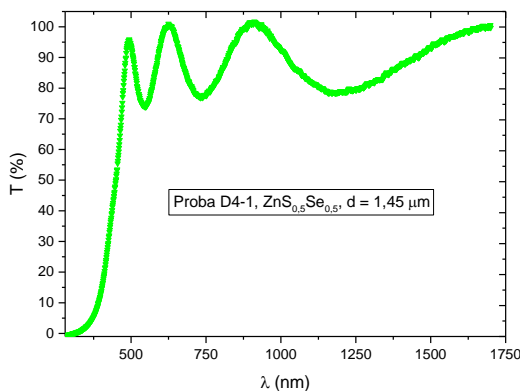


Fig. 2. Spectrul de transmisie a straturilor subțiri de $ZnS_{0,5}Se_{0,5}$

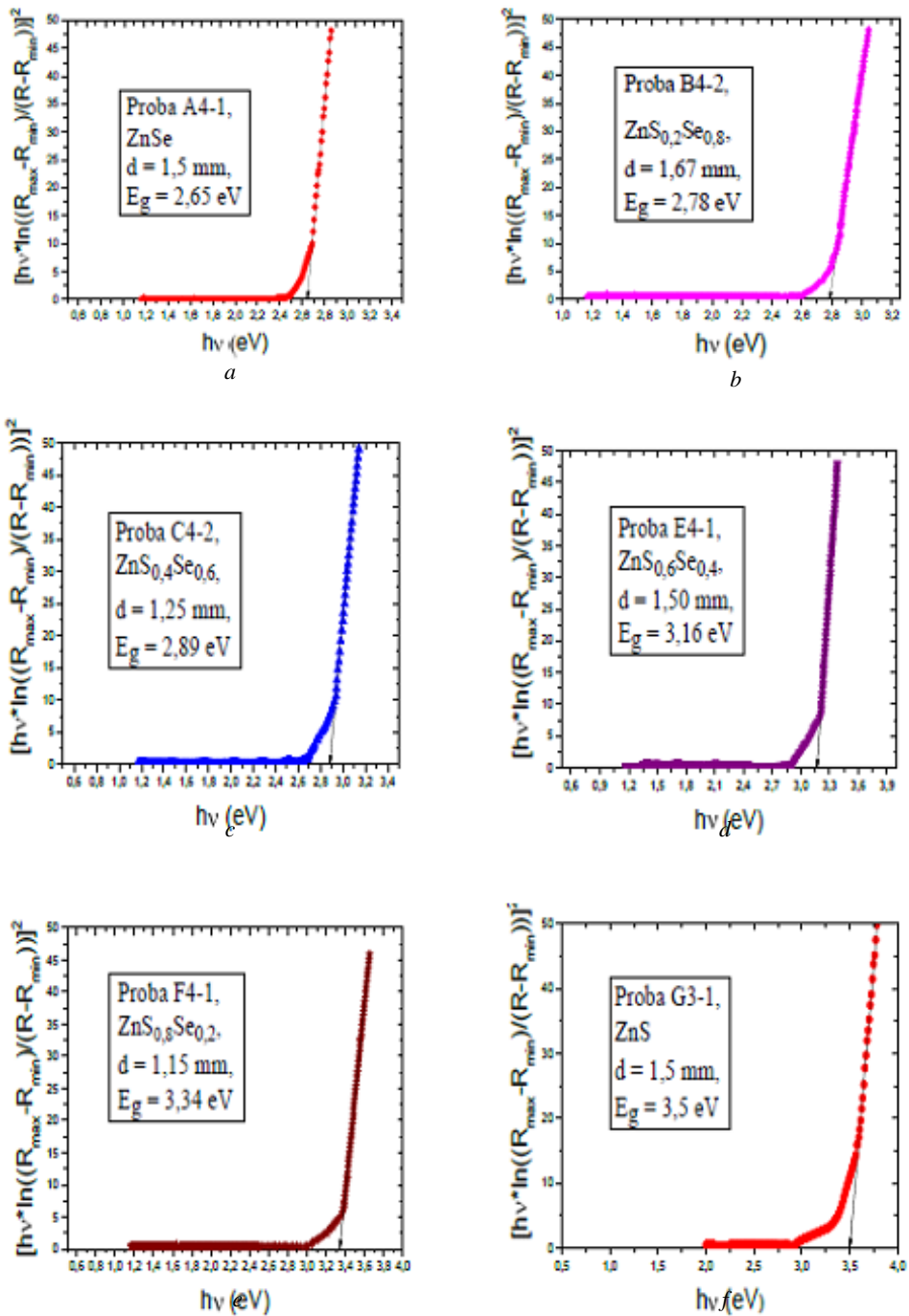


Fig. 3. Evoluția lărgimii benzii interzise E_g funcție de x pentru straturile subțiri de ZnS_xSe_{1-x}

În Fig. 3 a, b, c, d, e, f sunt reprezentate dependențele de tip $\left[hv \cdot \ln \left(\frac{R_{max} - R_{min}}{R - R_{min}} \right) \right]^2 = f(hv)$ pentru șase straturi de tip ZnS_xSe_{1-x} . Folosind metoda descrisă anterior, s-au obținut valorile lărgimii benzii interzise cuprinse între 2,65 eV și 3,50 eV. Pentru comparație în Tabelul 1 sunt prezentate valorile E_g determinată din spectrele de reflexie, din spectrele de absorbție și teoretice. Observăm că aceste valori sunt în bună concordanță.

Tabel 1. Compararea valorilor teoretice și experimentale ale E_g

Tipul semiconductor.	Lărgimea benzii interzise, E_g		
	Teoretică	Deteminată din spectrele de absorbție	Deteminată din spectrele de reflexie
ZnSe	2,7	2,68	2,65
ZnS _{0,2} Se _{0,8}		2,77	2,78
ZnS _{0,4} Se _{0,6}		2,88	2,89
ZnS _{0,5} Se _{0,5}		3,05	3,06
ZnS _{0,6} Se _{0,4}		3,14	3,16
ZnS _{0,8} Se _{0,2}		3,32	3,34
ZnS	3,5	3,50	3,50

IV. Concluzii

Lucrarea respectivă descrie rezultatele obținute la studiul spectrelor de reflexie ale straturilor subțiri de ZnS_xSe_{1-x}. S-a constatat că reflexia straturilor respective în domeniul lungimilor de undă 350-1150 nm nu depășește 1%.

Analizând evoluția lărgimii benzii interzise a ZnS_xSe_{1-x}, determinată din spectrele de reflexie, observăm că valorile E_g cresc odată cu creșterea parametrului x . Rezultatele obținute ne demonstrează marele avantaj oferit de metoda respectivă de calcul. Aceasta este o metodă mai simplă față de alte metode, cu mai puține calcule.

Bibliografie:

1. POP, I., CRIȘAN, M., *Calculul benzilor de energie în corpul solid*, București, Editura Științifică și Enciclopedică, 1994.
2. KUMAR, V., SHARMA, S. Kr., SHARMA, T. P., SINGH, V., *Band gap determination in thick films from reflectance measurements*, Optical Materials 12 (1999), p. 115-119.
3. SONG J.H., SIM E.D., BAEK K.S., CHANG S.K., *Optical properties of ZnS_xSe_{1-x} random and ordered alloys grown by metalorganic atomic layer epitaxy*, Journal of Crystal Growth V 214-215 (2000), p. 460-464.
4. AMBRICO, M., PERNA G., SMALDONE D., SPEZZACATENA C., STAGNO V. and CAPOZZI, V., *Structural and optical parameters of ZnS_xSe_{1-x} films deposited on quartz substrates by laser ablation*, Semicond. Sci. Technol. 13 (1998), p. 1446-1455.
5. SPÂNULESCU, I., *Fizica straturilor subțiri și aplicațiile acestora*, București, Editura Științifică, 1975.