

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЩЕЛЕВЫХ КРЕМНИЕВЫХ МИКРОСТРУКТУР: ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

С. А. Дьяков^{a,b}, Е. В. Астрова^c, Т. С. Перова^b,
С. Г. Тиходеев^d, Н. А. Гуппиус^d, В. Ю. Тимошенко^a*

^a *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

^b *Trinity College Dublin, Dublin 2, Ireland*

^c *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия*

^d *Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 7 октября 2010 г.

Экспериментально и теоретически исследованы спектры отражения щелевых кремниевых структур, состоящих из чередующихся кремниевых слоев и пустот (щелей) с периодом $a = 4\text{--}6$ мкм, в среднем ИК-диапазоне ($\lambda = 2\text{--}25$ мкм) при освещении образцов по нормали к поверхности светом, поляризованным вдоль кремниевых слоев и перпендикулярно им. Расчет выполнен методом матрицы рассеяния с учетом потерь на рэлеевское рассеяние в щелевом слое посредством добавления мнимых частей к показателям преломления кремния и воздуха в области щелей. Наблюдается хорошее согласие между экспериментальными и расчетными спектрами коэффициента отражения во всем исследуемом спектральном диапазоне. Из анализа экспериментальных и расчетных спектров найдены близкие друг к другу значения эффективных показателей преломления и двулучепреломления исследуемых структур в длинноволновой области спектра, в то время как значения, рассчитанные в модели эффективной среды в длинноволновом приближении ($\lambda \gg a$), дают существенно заниженные значения. Полученные результаты подтверждают эффективность используемого метода матрицы рассеяния для описания оптических свойств кремниевых микроструктур.

1. ВВЕДЕНИЕ

Щелевой кремний представляет собой периодическую одномерную структуру, состоящую из глубоких щелей с вертикальными стенками. Такие структуры обладают интересными оптическими характеристиками. В длинноволновой части спектра при $\lambda \gg a$, где a — период решетки, они проявляют свойства одноосного кристалла с высокой анизотропией эффективного показателя преломления [1, 2]. Для ИК-света с $\lambda \approx a$ структура является одномерным фотонным кристаллом с широкими стоп-зонами [3, 4]. В щелевом кремнии обнаружены эффекты усиления комбинационного рассеяния при возбуждении лазерным излучением с $\lambda = 1.06$ мкм [5]. Если

для нормального падения света в области $\lambda \gg a$ оптические характеристики щелевых структур хорошо описываются в рамках модели эффективной среды (так называемого приближения анизотропии формы в системе параллельных пластин [6]), то спектры в более коротковолновой области до настоящего времени не были описаны теоретически.

Целью настоящей работы является расчет спектров отражения и пропускания образцов щелевого кремния в диапазоне длин волн, порядка и превышающих период структуры, и сравнение их с экспериментом.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Щелевые кремниевые структуры могут быть изготовлены различными методами «сухого» и жид-

*E-mail: dyakovs@tcd.ie

Таблица 1. Геометрические параметры исследуемых образцов щелевого кремния

Образец	Период a , мкм	Толщина стенок d_{Si} , мкм	Глубина щелей l , мкм	Полная толщина образца, H , мкм
24a4	4	1.0	30	200
24a5	5	1.2	30	200
24a6	6	1.4	30	200
s5	5	1.8	42	225
s6	6	2.6	42	225

кофазного травления [7–11]. Среди этих методов анизотропное щелочное травление кремния ориентации (110) выгодно отличается тем, что позволяет изготавливать структуры с практически вертикальными стенками, обладающими наиболее гладкой поверхностью [12]. Ребра таких структур образованы кристаллографическими плоскостями (111), которые травятся примерно в 600 раз медленнее, чем плоскости (110) [9].

В настоящей работе исследовались щелевые структуры из кристаллического кремния n -типа с удельным сопротивлением 5 Ом·см и ориентацией поверхности (110), изготовленные анизотропным травлением при $T = 70^\circ\text{C}$ в 44-процентном водном растворе гидроксида калия. Исходные образцы имели двустороннюю полировку, их поверхности покрывались термическим окислом или слоем нитрида кремния. Затем с лицевой стороны с помощью фотолитографии в этом слое вскрывались окна под щели. Длина этих окон составляла 400 мкм, ширина, в зависимости от периода, 2–4 мкм. Щели, стенки которых образованы плоскостями (111), составляли решетку с периодом a , равным 4, 5 и 6 мкм для разных образцов. В табл. 1 приведены параметры образцов, а на рис. 1а показано поперечное сечение одной из таких структур. На рис. 1б показана схема образца, разрезанного вдоль и поперек щелей. Известно, что торцевые стенки щелей, получаемых при анизотропном травлении Si(110), являются наклонными [9]. Кроме того, дно щелей в исследованных структурах является V-образным с углом при вершине около 120° [13]. В описанных ниже расчетах мы, однако, пренебрежем этими деталями и будем считать для простоты щели бесконечно длинными в направлении оси y и имеющими прямоугольное сечение в плоскости xz .

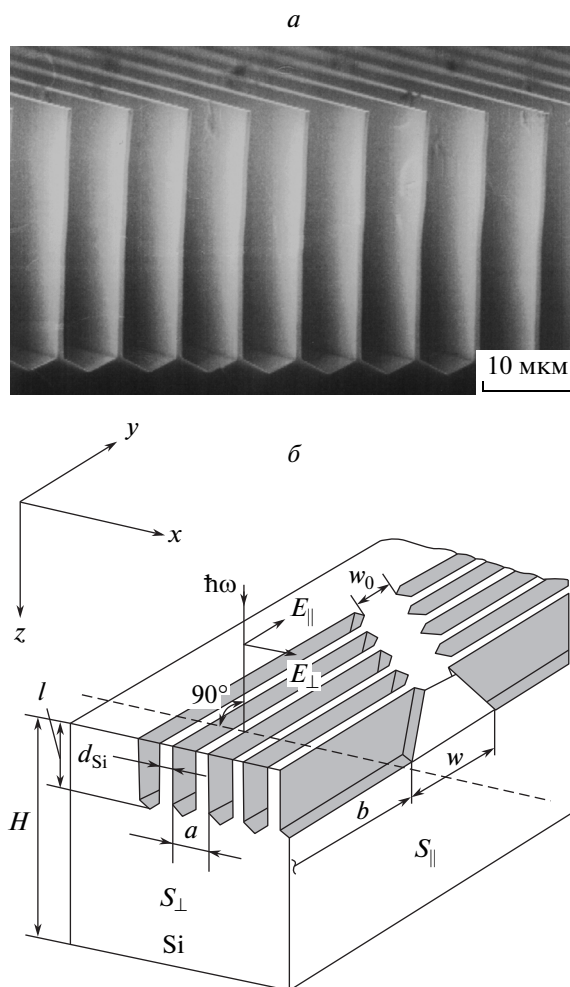


Рис. 1. Структуры щелевого кремния: *a* — изображение, полученное при помощи сканирующего электронного микроскопа; *б* — образец в разрезе и схема оптических измерений: Si — кремниевая подложка; S_{\parallel} (S_{\perp}) — сечение, параллельное (перпендикулярное) щелям; штриховая линия — перпендикуляр к кремниевым стенкам; b — длина щели в ее нижней части; w и w_0 — ширины укрепляющего кремниевого промежутка между щелями соответственно на поверхности образца и на глубине щелей

Геометрия оптических измерений показана на рис. 1б. Спектры отражения и пропускания щелевых структур в поляризованном свете были измерены при помощи фурье-спектрометров Digilab FTS-60A и FTS-6000 в спектральном диапазоне $450\text{--}6000\text{ см}^{-1}$ с разрешением 8 см^{-1} при E_{\parallel} - и E_{\perp} -поляризациях. Электрическое поле, соответствующее E_{\parallel} -поляризации, направлено параллельно щелям, а E_{\perp} -поляризации — перпендикулярно. Спектры записаны при нормальном падении света на поверхность образца.

3. РАСЧЕТ

Для расчета спектров отражения и пропускания света был использован метод матрицы рассеяния [14], основанный на разбиении структуры на горизонтальные слои, периодические или однородные по горизонтали и однородные по вертикали, на разложении решений уравнений Максвелла в ряд Фурье и сшивке решений в соседних слоях с использованием максвелловских граничных условий. Когда падающий свет освещает модулированную поверхность щелевого кремния, структура ведет себя как дифракционная решетка. Падающая волна связывается с дифрагированными (распространяющимися) и экспоненциальными волнами, и формально необходимо использовать бесконечно-мерную матрицу рассеяния, которая при численных расчетах обрезается до матрицы конечной размерности.

Для формулировки метода матрицы рассеяния для фотонно-кристаллических слоев нам необходимо определить сходящиеся и расходящиеся состояния в задаче рассеяния и развить метод расчета матрицы рассеяния, переводящей сходящиеся решения в расходящиеся. В основе рассматриваемого метода лежит разложение по плоским волнам в плоскости, перпендикулярной оси z , и на практике учитывается лишь конечное число N_g брэгговских гармоник. Двумерная, в общем случае, дифракционная решетка связывает падающую электромагнитную волну с частотой ω и волновым вектором $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$,

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{\omega}{c} \sin \vartheta \cos \varphi, \\ k_y &= \frac{\omega}{c} \sin \vartheta \sin \varphi, \\ k_z &= \frac{\omega}{c} \cos \vartheta, \end{aligned} \quad (1)$$

со всеми брэгговскими гармониками на той же частоте ω и волновыми векторами

$$\mathbf{k}_{\mathbf{G},a}^{\pm} = (k_x, \mathbf{G}, k_y, \mathbf{G}, \pm k_z, \mathbf{G}, a). \quad (2)$$

В формулах (1), (2) ϑ — угол между вектором \mathbf{k} и положительным направлением оси z , φ — угол между проекцией \mathbf{k} на плоскость xy и осью x ,

$$\begin{aligned} k_{x,\mathbf{G}} &= k_x + G_x, \quad k_{y,\mathbf{G}} = k_y + G_y, \\ k_{z,\mathbf{G},a} &= \sqrt{\frac{\omega^2 \varepsilon_a}{c^2} - (k_x + G_x)^2 - (k_y + G_y)^2}, \end{aligned} \quad (3)$$

ε_a — диэлектрические проницаемости вакуума ($a = v$) и подложки ($a = s$), а

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{d}(g_x, g_y, 0), \quad g_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4)$$

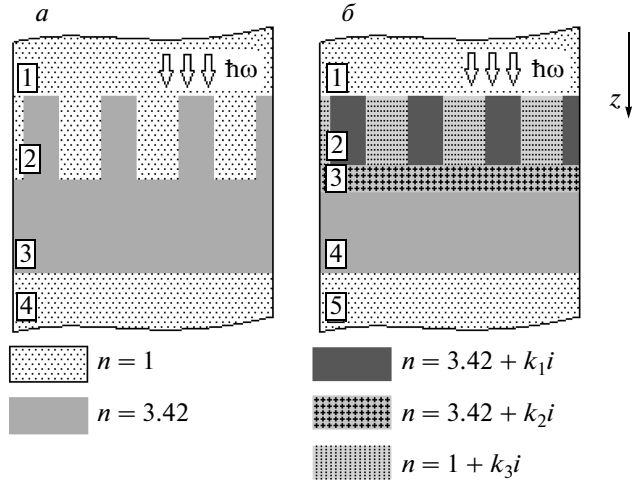


Рис. 2. Схемы образца щелевого кремния для расчета по методу матрицы рассеяния: *a* — модель идеального образца; *b* — модель реального образца, учитывающая диффузное рассеяние

являются векторами двумерной обратной решетки.

Входящий и исходящий наборы задачи рассеяния выбираются в виде гипервекторов $\vec{\mathbb{B}}_{in}$ и $\vec{\mathbb{B}}_{out}$ размерности $4N_g$, составленных из амплитуд сходящихся и расходящихся плоских волн:

$$\vec{\mathbb{B}}_{in} = \begin{pmatrix} \vec{A}_v^+ \\ \vec{A}_s^- \end{pmatrix}, \quad \vec{\mathbb{B}}_{out} = \begin{pmatrix} \vec{A}_s^+ \\ \vec{A}_v^- \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где $\vec{A}_{v,s}^{\pm}$ — $2N_g$ -мерные гипервекторы парциальных амплитуд сходящихся и расходящихся плоских волн. Полное описание линейного отклика фотонно-кристаллического слоя на частоте ω содержится в полной матрице рассеяния \mathbb{S} , которая связывает входящий гипервектор амплитуд $\vec{\mathbb{B}}_{in}$ с исходящим гипервектором $\vec{\mathbb{B}}_{out}$:

$$\vec{\mathbb{B}}_{out} = \mathbb{S} \vec{\mathbb{B}}_{in}. \quad (6)$$

Определенная таким образом полная матрица рассеяния имеет размерность $4N_g \times 4N_g$. Расчет $4N_g \times 4N_g$ -матрицы рассеяния \mathbb{S} фотонно-кристаллического слоя состоит из следующих основных моментов.

1. Фотонно-кристаллический слой разбивается на систему однородных вдоль оси z слоев (в случае модельной структуры на рис. 2а это четыре слоя: вакуум, модулированный слой кремния, однородный слой кремния и вакуумная подложка). В каждом слое из уравнений Максвелла находятся собственные моды оператора распространения вдоль оси z .

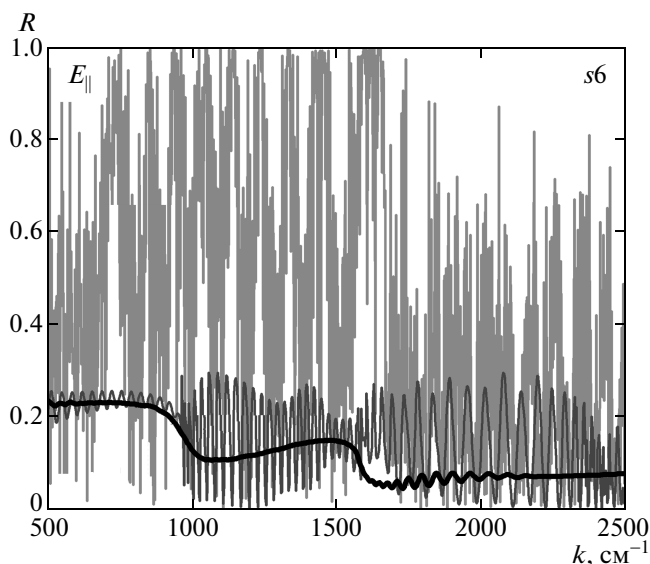


Рис. 3. Измеренный (жирная линия) и рассчитанные спектры отражения при E_{\parallel} -поляризации света для образца щелевого кремния $s6$. Расчеты проводились в предположении модели идеального образца для случаев конечной (рис. 2а) и полубесконечной кремниевых подложек (соответственно тонкие серая и черная линии)

2. Собственные значения оператора распространения определяют матрицу распространения, а собственные векторы образуют материальную матрицу, дающую связь между амплитудами собственных мод оператора распространения вдоль оси z в слое и локальными компонентами электромагнитного поля.

3. Из материальных матриц в двух соседних слоях можно построить интерфейсную матрицу, связывающую амплитуды собственных мод в соседних слоях, а на ее основе, используя итерационную процедуру (см., например, работу [15]), можно рассчитать полную матрицу рассеяния \mathbb{S} всей фотонно-кристаллической структуры.

4. Зная компоненты матрицы рассеяния, легко найти коэффициенты отражения, пропускания, поглощения и дифракции, а также распределение электромагнитных полей в фотонно-кристаллическом слое.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Как видно из сказанного выше, для расчета оптических свойств структуры необходимо представить ее в виде последовательности слоев, однород-

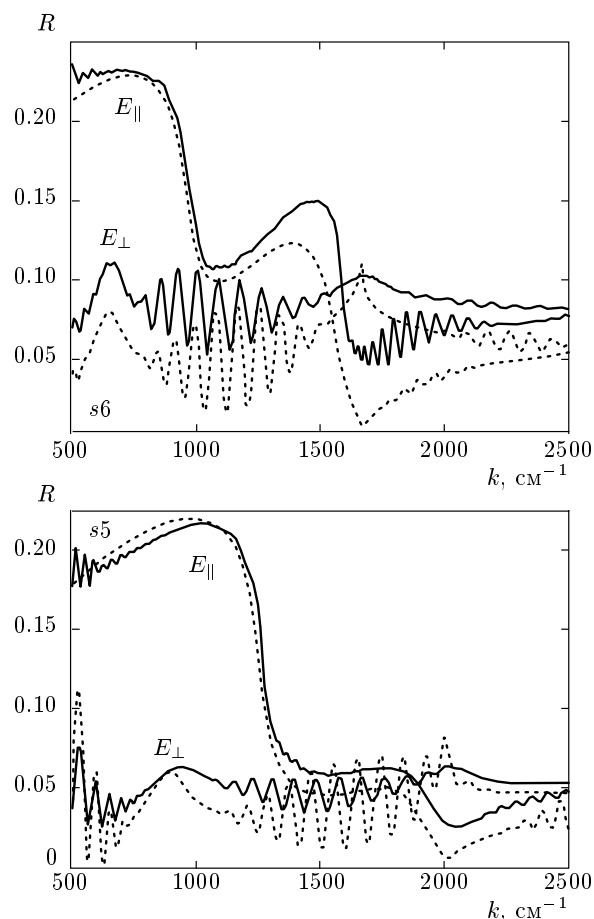


Рис. 4. Измеренные (сплошные кривые) и рассчитанные (пунктирные) спектры отражения при E_{\parallel} - и E_{\perp} -поляризациях света для образцов щелевого кремния $s5$ и $s6$. При расчете предполагалось наличие рассеивающего слоя на границе модулированный слой – подложка, комплексный показатель преломления которого выбран равным $3.42 + 0.5i$, показатель преломления в модулированном слое для кремния $3.42 + 0.2i$, а для воздуха $1 + 0.05i$ (см. рис. 2б)

ных по оси z и, возможно, периодических в направлении, перпендикулярном оси z . На рис. 2а приведен вариант такого разбиения исследуемых образцов на слои. Структура разделена на четыре слоя, два из которых, первый и четвертый (вакуум), являются полубесконечными, второй (щелевой слой кремний/воздух) — периодический в плоскости подложки и однородный в направлении оси z , а третий (кремниевая подложка) — полностью однородный слой. При выборе оптических коэффициентов мы пренебрегли поглощением света на свободных носителях заряда в кремнии, а также взаимодействием света с фононами кристаллической решетки.

Рассчитанные спектры отражения для описанной модельной структуры оказываются существенно отличающимися от измеренных (рис. 3). Частые осцилляции расчетной кривой (тонкая серая линия) являются следствием резонансов Фабри–Перо на достаточно толстой (порядка 200 мкм) кремниевой подложке. Для их наблюдения в эксперименте нужно, как минимум, чтобы длина когерентности используемого света превосходила толщину образца, что не выполняется в нашем случае. В расчетах, чтобы исключить такие осцилляции, обычно предполагают подложку полубесконечной. Соответствующая расчетная кривая также показана на рис. 3 (тонкая черная линия). Характерная частота оставшихся осцилляций расчетного спектра теперь примерно соответствует эксперименту (они связаны с резонансами Фабри–Перо на слое целевого кремния, см. обсуждение ниже), однако амплитуда этих осцилляций и качественная форма спектра по-прежнему весьма далеки от наблюдающихся в эксперименте.

Причиной такого несоответствия может быть рэлеевское рассеяние света на нерегулярностях щелевой структуры как в модулированном слое, так и в переходном слое «модулированная часть–подложка», состоящем из V-образных углублений на дне щелей. Такое рассеяние может быть весьма существенным, поскольку отношение показателей преломления указанных слоев весьма велико.

Хорошо известно, что шероховатость поверхностей вносит значительные погрешности в определение показателей преломления материалов методами эллипсометрии [16], особенно их мнимых частей. Последнее совершенно естественно, так как шероховатости приводят к диффузному рассеянию и, в конечном счете, к потерям при распространении света. В литературе можно найти большое количество примеров (см., например, работы [17–20]), когда потери на рассеяние света на шероховатостях границ удавалось удовлетворительно учесть путем добавления мнимой части к действительным (при отсутствии шероховатостей) показателям преломления прозрачных материалов или путем увеличения мнимой части показателя преломления поглощающих материалов¹⁾. Следуя этому рецепту, припишем кремнию в периодическом и переходном слоях комплексные части показателя преломления, соответственно рав-

ные k_1 и k_2 , а воздуху в периодическом слое — k_3 . Для простоты будем считать, что параметры $k_{1,2,3}$ не зависят от длины волны света.

Получающаяся в результате модельная структура изображена выше на рис. 2б. Толщина t третьего слоя связана с V-образной формой дна и зависит от ширины щели: $t = d_{air}/2\sqrt{3}$, где $d_{air} = a - d_{Si}$ — ширина щели.

Численное моделирование показывает, что параметры k_1 и k_2 начинают давать заметный вклад в спектры отражения при значениях, превышающих 0.1, а k_3 — превышающих 0.03. Расчеты, проведенные с разными значениями k_1 , k_2 и k_3 , варьировавшимися в диапазоне 0.03–3, показали, что наилучшее согласие с экспериментальными спектрами отражения получается при $k_1 = 0.2$, $k_2 = 0.5$ и $k_3 = 0.05$ (рис. 4). Такой подход позволил получить хорошее качественное совпадение расчетных и экспериментальных спектров отражения и для других образцов (см. рис. 5).

Полученные экспериментальные и теоретические спектры осциллируют вследствие резонансов Фабри–Перо при прохождении падающего света через модулированный слой структуры. Используя условие резонанса Фабри–Перо

$$\Delta \left(\frac{1}{\lambda} \right) = \frac{1}{2n_{eff}l}, \quad (7)$$

где $\Delta(1/\lambda)$ — разность обратных длин волн соседних резонансов Фабри–Перо, а l — глубина щелевого слоя, для экспериментальных и расчетных спектров отражения можно рассчитать получающиеся эффективные показатели преломления n_{eff} щелевого кремния (табл. 2) в наиболее низкочастотной области этих спектров, где лучше выполняется приближение эффективной среды. Данные величины могут быть сравнены со значениями, получающимися в модели эффективной среды при $\lambda \gg a$ [6]:

$$n_{eff,\parallel}^2 = f n_{Si}^2 + (1-f) n_{air}^2, \quad (8)$$

$$\frac{1}{n_{eff,\perp}^2} = f \frac{1}{n_{Si}^2} + (1-f) \frac{1}{n_{air}^2},$$

где $n_{eff,\parallel}$ ($n_{eff,\perp}$) — эффективный показатель преломления щелевого кремния, соответствующий направлению электрического поля волны, параллельному (перпендикулярному) щелям, $f = d_{Si}/a$ — фактор заполнения. Из табл. 2 следует, что метод матрицы рассеяния позволяет точнее рассчитать эффективные показатели преломления периодических слоев кремния, чем теория эффективной среды. Например, экспериментально полученные периоды осцилляций коэффициента отражения

¹⁾ Строго говоря, нужно различать идеально-периодическую модуляцию поверхностей раздела в фотонно-кристаллической структуре и их нерегулярную шероховатость. Периодические модуляции учитываются в методе матрицы рассеяния точно и не требуют добавления комплексности для учета радиационных потерь [14].

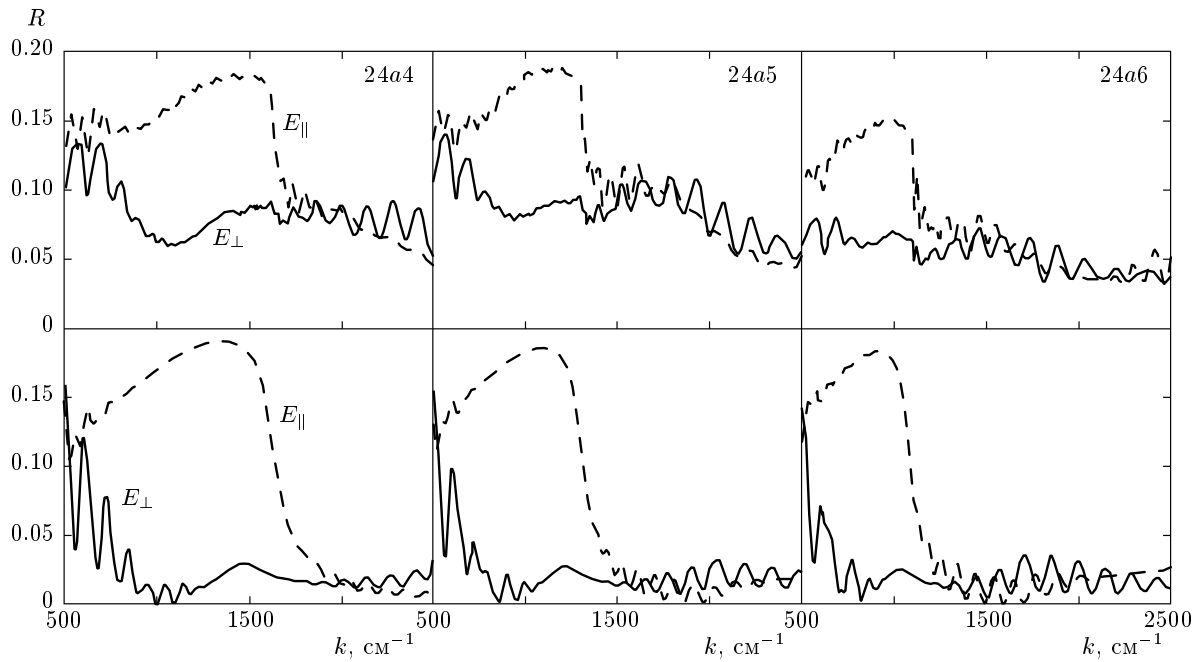


Рис. 5. Экспериментальные (верхние рисунки) и расчетные (нижние рисунки) спектры отражения образцов 24a4, 24a5 и 24a6

Таблица 2. Эффективные показатели преломления щелевого кремния, вычисленные из условия для резонансов Фабри – Перо для спектров отражения, полученных экспериментально, рассчитанных при помощи метода матрицы рассеяния, а также вычисленные в модели эффективной среды

Образец	$n_{eff,\parallel}$			$n_{eff,\perp}$			$\Delta n_{eff} = n_{eff,\parallel} - n_{eff,\perp}$		
	24a4	24a5	24a6	24a4	24a5	24a6	24a4	24a5	24a6
Эксперимент	1.5 ± 0.1	1.7 ± 0.1	1.5 ± 0.1	2.7 ± 0.1	3.0 ± 0.2	3.2 ± 0.3	1.2 ± 0.1	1.2 ± 0.2	1.7 ± 0.3
Метод матрицы рассеяния	1.5 ± 0.1	1.7 ± 0.1	1.4 ± 0.2	2.7 ± 0.1	3.0 ± 0.1	3.3 ± 0.2	1.2 ± 0.1	1.3 ± 0.2	1.9 ± 0.3
Модель эффективной среды	1.1 ± 0.1	1.1 ± 0.1	1.1 ± 0.1	1.9 ± 0.1	1.9 ± 0.1	1.9 ± 0.1	0.8 ± 0.1	0.8 ± 0.1	0.8 ± 0.1

(69 см^{-1} и 125 см^{-1}) в низкочастотной области спектра для образца 24a4 оказываются весьма близкими к рассчитанным по методу матрицы рассеяния (72 см^{-1} и 127 см^{-1}). В то же время периоды осцилляций, соответствующие возникновению резонансов Фабри – Перо на однородном слое толщиной l и с показателями преломления, рассчитанными по формулам (8), оказываются равными 89 см^{-1} и 148 см^{-1} . Это различие объясняется, по-видимому, тем, что условие применимости приближения эффективной среды, $a \ll \lambda$, не выполняется с достаточной точно-

стью: в нашем случае $a/\lambda = 0.18\text{--}0.27$.

В высокочастотной области спектров отражения условие электростатического приближения не выполняется ($\lambda \sim a$). Рассчитанные методом матрицы рассеяния периоды осцилляций в указанной области (140 см^{-1} и 120 см^{-1}) близки к экспериментальным (141 см^{-1} и 138 см^{-1}). Формальное использование формул (7), (8) приводит к результатам, значительно отличающимся от экспериментальных (13 см^{-1} и 21 см^{-1}).

Итак, в работе были исследованы спектры отражения и пропускания структур щелевого кремния с разными периодами и толщинами стенок. Полученные экспериментально спектры сравнивались с рассчитанными методом матрицы рассеяния. Показано, что удовлетворительное согласие расчетов методом матрицы рассеяния с экспериментом можно получить, добавив мнимые части к показателям преломления кремния и воздуха в области модуляции для учета потерь на рэлеевское рассеяние на шероховатостях границ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 08-02-01408, 09-02-00782). Один из авторов (С. А. Д.) благодарит IRCSET (Irish Research Council for Science, Engineering, and Technology) за финансовую поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. Е. В. Астрова, Т. С. Перова, В. А. Толмачев, ФТП **37**, 4 (2003).
2. Е. Ю. Круткова, В. Ю. Тимошенко, Л. А. Головань и др., ФТП **40**, 7 (2006).
3. V. A. Tolmachev, T. S. Perova, E. V. Astrova et al., Phys. Stat. Sol. (a) **197**, 2 (2003).
4. V. A. Tolmachev, E. V. Astrova, Yu. A. Pilyugina et al., Opt. Mater. **28**, 5 (2005).
5. D. A. Mamichev, V. Yu. Timoshenko, A. V. Zoteyev et al., Phys. Stat. Sol. (b) **246**, 1 (2009).
6. М. Борн, Э. Вольф, *Основы оптики*, Наука, Москва (1973).
7. M. Elwenspoek and H. V. Jansen, *Silicon Micromachining*, Cambridge Univ. Press (2004).
8. З. Ю. Готра, *Технология микроэлектронных устройств. Справочник*, Радио и связь, Москва (1991).
9. D. L. Kendall, Ann. Rev. Mater. Sci. **9**, 373 (1979).
10. G. Barillaro, A. Nannini, and F. Pieri, J. Electrochem. Soc. **149**, 3 (2002).
11. E. V. Astrova and G. V. Fedulova, J. Micromech. Microeng. **19**, 095009 (2009).
12. E. V. Astrova, V. A. Tolmachev, Yu. A. Zharova et al., Sol. St. Phenom. **156–158**, 547 (2010).
13. A. Holke and H. T. Henderson, J. Micromech. Microeng. **9**, 1 (1999).
14. S. G. Tikhodeev, A. L. Yablonskii, E. A. Muljarov et al., Phys. Rev. B **66**, 045102 (2002).
15. D. Y. K. Ko and J. C. Inkson, Phys. Rev. B **38**, 9945 (1988).
16. R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light*, North-Holland Personal Library (1987).
17. R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, Phys. Rev. B **5**, 1 (1973).
18. H. Benisty, D. Labilloy, and C. Weisbuch, Appl. Phys. Lett. **76**, 532 (2000).
19. H. Benisty, Ph. Lalanne, and S. Olivier, Opt. Quant. Electron. **34**, 205 (2002).
20. A. A. Maradudin and D. L. Mills, Phys. Rev. B **11**, 1392 (1975).