

УДК 535.343.1

## ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО КРЕМНИЯ

Д. С. Безмельницин, Д. А. Лизункова, И. А. Шишкин

В данной работе приводятся результаты исследований оптических свойств структур с кремниевыми нанонитями, сформированными методом металл-стимулированного химического травления (МСХТ). Была показана зависимость коэффициента отражения от времени травления. Также было проведено моделирование распространения электрического поля на поверхности нитевидной структуры кремния, что позволило описать захват электрического поля в нанонитях, приводящие к снижению коэффициента отражения во всем исследуемом спектральном диапазоне. Симуляция распределения электрического поля была проведена в пакете COMSOL Multiphysics. Моделирование прохождения света в такой структуре показало, что нити хорошо захватывают свет, однако реальная система кремниевых нитей является более сложной, что в данной модели не учитывается.

**Ключевые слова:** МСХТ, кремниевые нанонити, пористый кремний, наноразмерные структуры, коэффициент отражения.

Активный интерес к нанотехнологиям и наноматериалам появился во второй половине XX века и связан с обнаружением новых уникальных физических и химических свойств твердотельных структур с нанометровыми ( $1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м}$ ) размерами элементов. При таких размерах наиболее ярко проявляется волновая природа электрона, и доминирующую роль приобретают квантовые процессы, что в свою очередь открывает новые возможности в развитии методов и обработки информации, получения электрической энергии, создания высокоэффективных медицинских препаратов и в других актуальных для человечества областях.

Для кремниевых нанокристаллов нитевидной формы (нанонитей) с поперечными размерами менее 10 нм реализуется так называемый квантовый размерный эффект для носителей заряда, который приводит к росту ширины запрещенной зоны и сдвигу края оптического поглощения в высокоэнергетическую область. Оптические свойства

кремниевых наноструктур с большими поперечными размерами будут существенно зависеть от эффектов, связанных с пространственным распределением локальных электрических полей, и обуславливаться рассеянием света как отдельными нанообъектами, так и их ансамблями. Изучение таких эффектов в наноструктурах в виде ансамблей кремниевых нанонитей (КНН) особенно актуально, поскольку они могут быть легко интегрируемы с устройствами микроэлектроники и сенсорики, что приведет как к улучшению характеристик последних, например, солнечные элементы, транзисторы и сенсоры, так и создание совершенно новых устройств и материалов для различных применений, включая биофотонику и медицину.

Существует ряд практических проблем для создания светочувствительных структур, в которых необходимо многократно уменьшить коэффициент отражения на границе двух сред. Моделирование распределения электрического поля на нитевидной

---

© Безмельницин Д. С., Лизункова Д. А., Шишкин И. А., 2020.  
Безмельницин Дмитрий Сергеевич ([dmitriy09-98@mail.ru](mailto:dmitriy09-98@mail.ru)),  
студент IV курса факультета электроники и приборостроения;  
Лизункова Дарья Александровна ([daria.lizunkova@yandex.ru](mailto:daria.lizunkova@yandex.ru)),  
старший преподаватель кафедры наноинженерии;  
Шишкин Иван Александрович ([shishkinivan9@gmail.com](mailto:shishkinivan9@gmail.com)),  
магистратуры физического факультета Самарского университета,  
443086, Россия, г. Самара, Московское шоссе, 34.

поверхности было выполнено для описания физических процессов при нестандартной геометрии поверхности.

### Условия и методы исследования

Структуры с нанонитями были получены методом металл-стимулированного химического травления [1], где активным компонентом травления являлись наночастицы серебра. В данной работе был использован двухступенчатый метод травления. На первом этапе серебряные наночастицы осаждались на поверхность кремниевой подложки неравномерным слоем. Далее на втором этапе химическое травление кремниевой подложки осуществлялось за счет «активации» наночастиц серебра, где через некоторое время участки поверхности непокрытые серебром трансформировались в нанонити. Серебряные наночастицы проходили внутрь кремниевой пластины. Соответственно при разных временах травления получались разной длины нитевидные структуры. Частицы серебра с

подложки кремния удалялись с помощью азотной кислоты (рис. 1).

Исследование спектральных характеристик поглощения проводилось на спектрофотометре Shimadzu UV-2450 в диапазоне длин волн 190–1000 нм. Скорость сканирования средняя. Шаг измерения 5 нм.

### Моделирование

Для описания прохождения электромагнитных волн в нитевидной структуре использовался программный пакет Comsol Multiphysics. Схематическое изображение моделируемой структуры и РЭМ изображение представлено на рис. 2.

Для решения поставленной задачи была выбрана система, где часть подложки кремния находится в воздушной среде, поэтому было взято волновое уравнение на основе перпендикулярности напряженности электрического поля для двух сред:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) - k_0^2 \epsilon_r \mathbf{E} = 0.$$

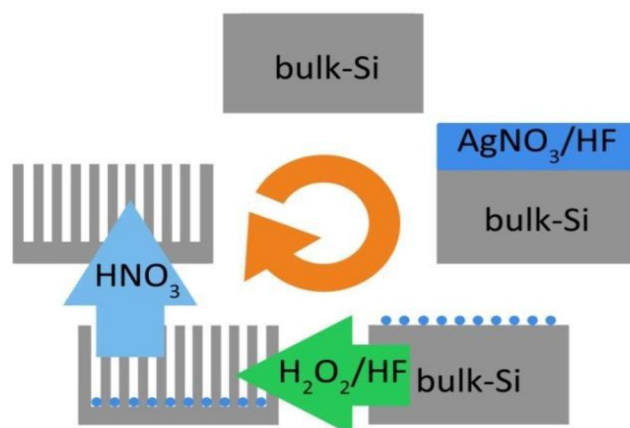


Рис. 1. Основные этапы металл-стимулированного химического травления [1]

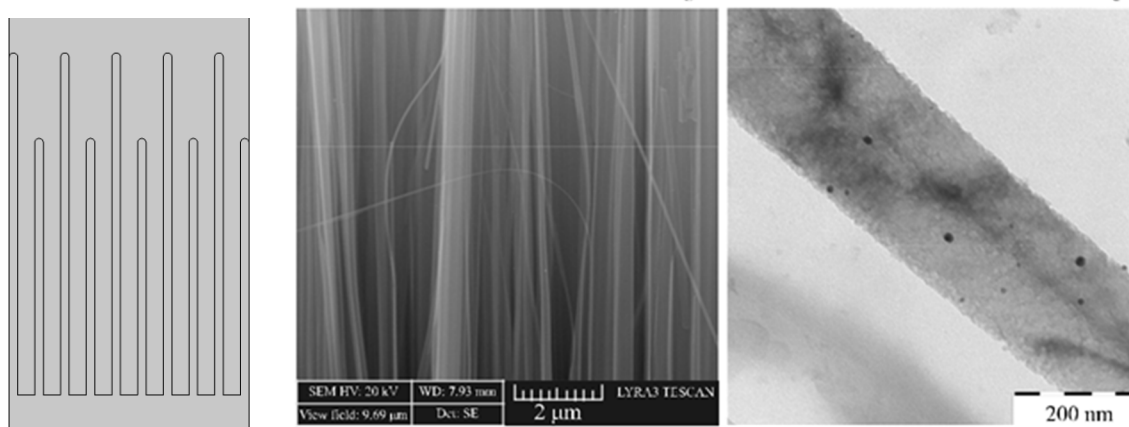
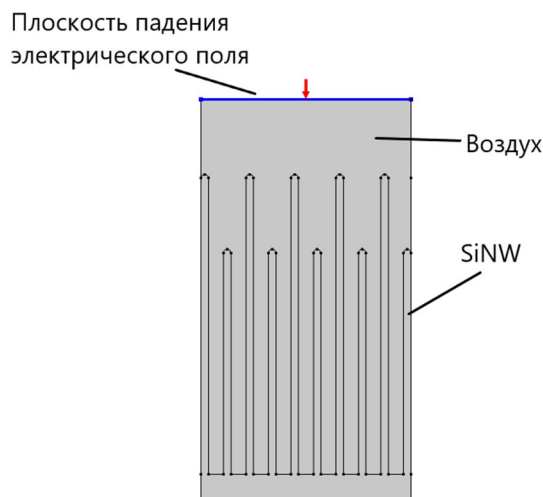


Рис. 2. Схематическое изображение моделируемой структуры и РЭМ изображение кремниевых нанонитей [2]



**Рис. 3. 2D модель части подложки кремния с нанонитями (SiNW), используемая в пакете Comsol Multiphysics**

По умолчанию в программном пакете уже прописаны основные оптические параметры двух сред для решения уравнения. В нашем случае такими средами служат воздух и кремний. Симуляция распространения эл. поля, проведенная в программном пакете в области оптического диапазона (300-1000 нм), позволяет рассчитать распределение ближнего поля.

Граничными условиями, при которых выполняется условие  $n \times E = 0$ , в данной системе являются боковые грани ограниченной воздушной среды. Верхняя грань данной схемы является плоскостью плотности потока энергии падающего излучения, которая выражается следующим выражением:

$$\Pi = \frac{\int_{\partial\Omega} (E - E_1) E_1}{\int_{\partial\Omega} E_1 \cdot E_1}$$

где  $\Pi$  – вектор Умова-Пойтинга. Поскольку модель находится в декартовой системе координат, то вектор падения эл. поля  $E_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

На рисунке 4 представлены результаты моделирования в программном пакете Comsol Multiphysics.

Из анализа видно, что на длине волны 350 нм наблюдается минимум электрического поля в структуре, т.е. происходит минимум отражения порядка 1 % (пунктирная линия). В реальном эксперименте, на длине волны 350 нм наблюдается отражение света 5 %. В ИК диапазоне так же имеются различия в отражении от 4 до 6 %. Это объяснимо

тем, что образцы, образованные в результате травления, имеют не такую упорядоченную структуру, чем в модели.

Контурная карта распределения электрического поля (рис.4) показывает глубину проникновения света в структуру данной длины волны. Разупорядоченная структура нитей хорошо захватывает излучение, что подтверждается в данной модели.

### Результаты и их обсуждение

В результате МСХТ были получены 6 образцов структур с нанонитями при различных временах травления (рис. 5). Основные параметры и режимы травления приведены в табл. 1.

Из таблицы видно, что в результате травления удаляется не только часть материала в объёме, но и поверхность. Далее был проведён анализ потери массы от времени травления (рис. 6 и табл. 2).

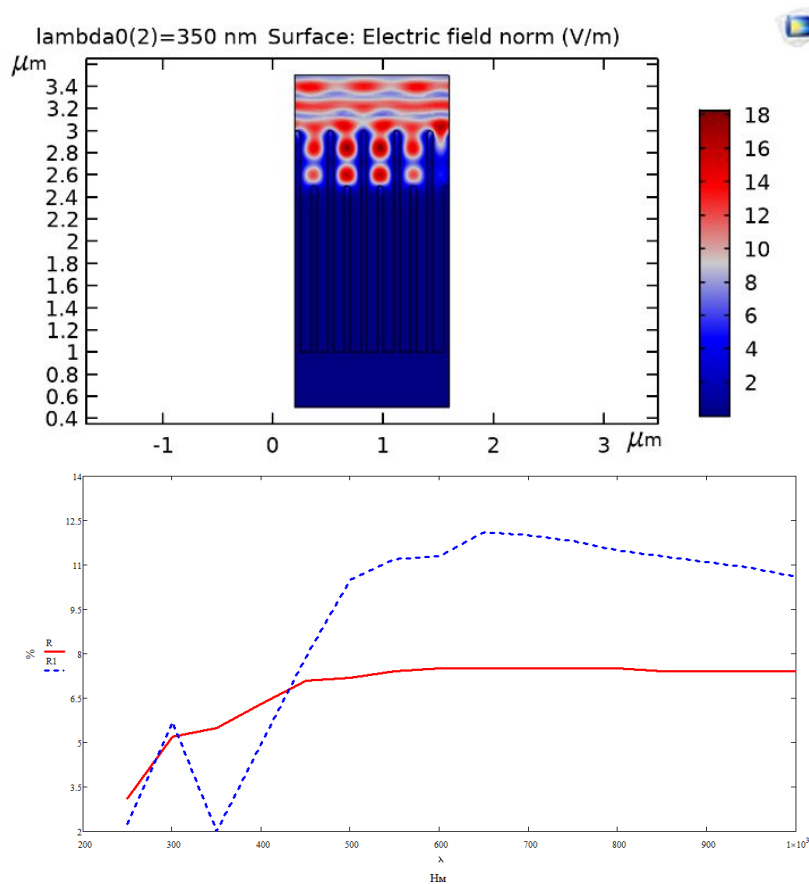
Из анализа результатов видно, что при увеличении времени травления образец активно теряет массу. Это объясняется ростом КНН в пластине кремния.

На (рис. 7) приведены спектральные характеристики коэффициента отражения.

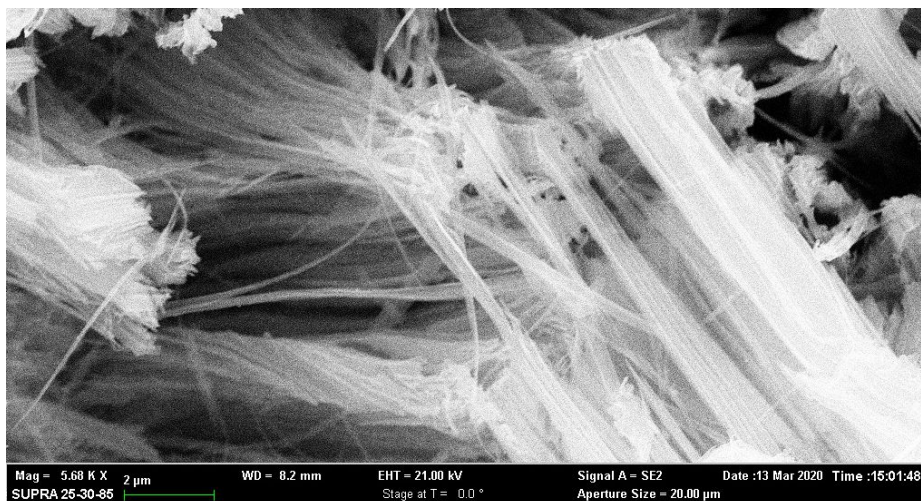
Полученные образцы имеют низкий коэффициент отражения (порядка 0,1–0,25 %) для длин волн от 600 нм до 1000 нм. Особенно высокий показатель отражения имеет образец №5, который травился в течение 15 минут. Однако есть чёткая зависимость спектральных характеристик отражения от времени травления, связанный сформированием нитей в подложке кремния: до 30 минут травления

происходит изменение поверхности пластины, после 30 минут наступает активный рост нитей, который продолжается до 45 минут включительно (отражение от 0,025 % на длине волны 350 нм). После 60 минут травления отражение возрастает до 0,05 % в коротковолновой части спектра. Ход экспериментальной кривой немного повторяет теоретическую кривую, рассчитанную в паке-

те Comsol Multiphysics, однако отражение экспериментальные данные значительно ниже. Это можно объяснить сложным механизмом роста самих нитевидных структур и их разупорядоченностью. При росте нитей, их диаметр уменьшается до определенного момента, а затем верхняя часть нитей полностью стравливается и процесс повторяется.



**Рис. 4.** 2D карта распределения электрического поля оптического диапазона при длине волны 350 нм и графики зависимости  $R(\lambda)$ , где пунктирная линия – модель структуры в Comsol Multiphysics и сплошная линия – экспериментальные данные [2]



**Рис. 5.** РЭМ изображение полученной нитевидной структуры

Таблица 1

Основные параметры и режимы травления

Номер образца	Масса (до), мг	Время травления, мин	Толщина пластины (до), мкм	Масса (после), мг	Толщина пластины (после), мкм
1	404.3	60	335	350.1	310
2	225.4	10	325	212.5	320
3	259.6	45	335	227.7	320
5	158.7	15	330	143.6	320
6	244.2	30	340	216.6	330
7	210.8	5	330	201.9	330

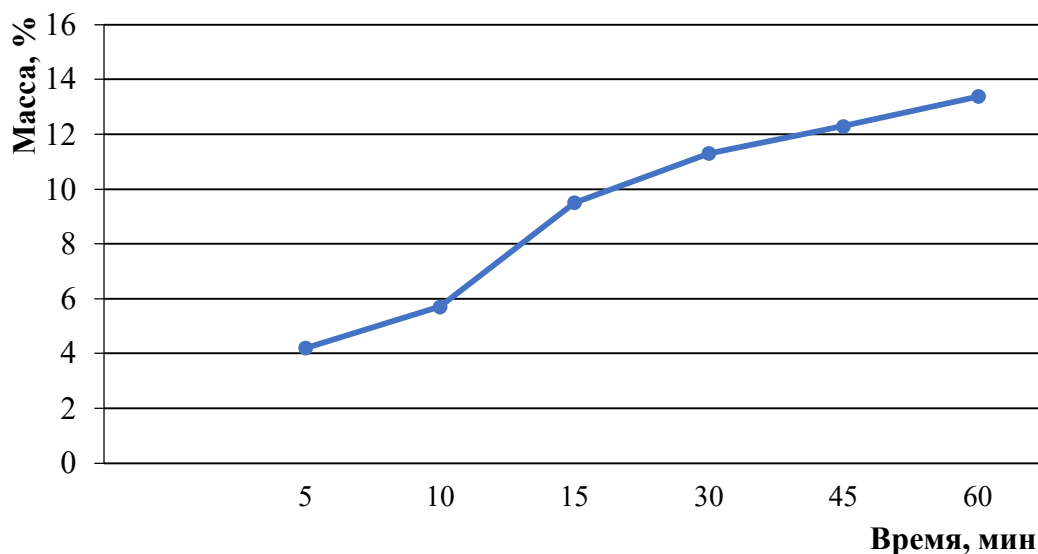


Рис. 6. Зависимость потери массы в процентах от времени травления

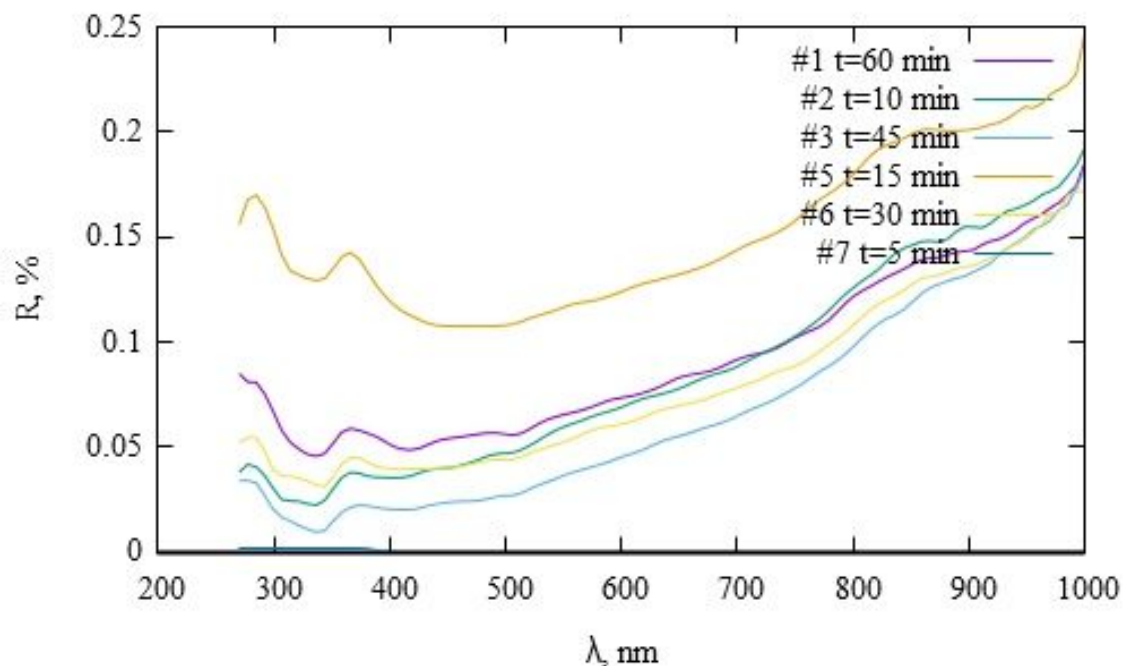


Рис. 7. Спектральные характеристики отражения образцов с КНН, изготовленных при различных временах травления

### Заключение

Таким образом, исследования показали, что нити, сформированные методом МСХТ на поверхности пластины кремния, позволяют значительно снизить коэффициент отражения до 0,1–0,25 % для длин волн от 600 нм до 1000 нм. Моделирование прохождения света в такой структуре показало, что нити хорошо захватывают свет, однако реальная система кремниевых нитей является более сложной, что в модели не учитывается.

### Литература

1. Optical Properties of Silicon Nanowires Fabricated by Environment-Friendly Chemistry / K. Gonchar, A. Zubairova, A. Schleusener [et. al.] // *Nanoscale Research Letters*. 2016. Vol. 11. P. 357.
2. Оптические свойства нитевидных наноструктур, полученных металлстимулированным химическим травлением пластин слабо легированного кристаллического кремния / К. А. Гончар, Л. А. Осминкина, В. Сиваков [и др.] // *Физика и техника полупроводников*. 2014. Т. 48. Вып. 12. С. 1654–1659.

## NANOSTRUCTURED SILICON OPTICAL PROPERTIES

D. S. Bezmelnitsin, D. A. Lizunkova, I. A. Shishkin

This work presents the results of studies of the optical properties of structures with silicon nanowires formed by metal-stimulated chemical etching (MACE). The dependence of the reflection coefficient on the etching time shown. We also simulated the propagation of an electric field on the surface of a silicon filament structure, which made it possible to describe the capture of an electric field in nanowires, leading to a decrease in the reflection coefficient in the entire investigated spectral range. The electric field distribution simulated using the COMSOL Multiphysics software package. Modeling the transmission of light in such a structure showed that the filaments capture light well, but the real system of silicon filaments is more complex, which is not taken into account in this model.

**Key words:** MACE, silicon nanowires, nanoscale structures, reflection coefficient, COMSOL Multiphysics.

*Статья поступила в редакцию 08.07.2020 г.*

---

© Bezmelnitsin D. S., Lizunkova D. A., Shishkin I. A., 2020.  
 Bezmelnitsin Dmitry Sergeevich (dmitriy09-98@mail.ru),  
 student IV course of the Faculty of electronics and instrument engineering;  
 Lizunkova Daria Aleksandrovna (daria.lizunkova@yandex.ru),  
 senior lecturer of the Department of Nanoengineering;  
 Shishkin Ivan Aleksandrovich (shishkinivan9@gmail.com),  
 graduate student of the Physics Faculty, of the Samara University,  
 443086, Russia, Samara, Moskovskoye Shosse, 34.