

3D МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ СВЕТОВОЙ ВОЛНЫ В ПОРИСТО–ТЕКСТУРИРОВАННОЙ СТРУКТУРЕ

И. А. Шишкин, Л. А. Лизункова, Н. В. Латухина

В данной работе производилось моделирование распространения электрического поля световой волны на поверхности текстурированной структуры кремния, что позволило выявить оптимальные параметры пористого слоя, приводящие к снижению коэффициента отражения во всем исследуемом спектральном диапазоне. Симуляция распределения эл. поля была проведена в пакете COMSOL Multiphysics. Результаты моделирования распределения электрического поля показали, что полное отражение практически отсутствует. Большая часть электрического поля концентрируется в микропоры и на грани пирамид. Это наглядно подтверждает, что пористо-текстурированная поверхность с неупорядоченной системой пор разных диаметров может понизить коэффициент отражения до значения ниже 0,1 %.

Ключевые слова: светочувствительные структуры, пористый кремний, текстурированная поверхность, MACE, COMSOL Multiphysics.

Существует ряд практических проблем для создания светочувствительных структур, в которых необходимо многократно уменьшить коэффициент отражения на границе двух сред. В этой работе была выбрана текстурированная кремниевая подложка, которая изначально имела хорошие оптические характеристики, и было проведено химическое травление для улучшения поглощения света. Моделирование распределения электрического поля на пористой и исходной текстурированной поверхности было выполнено, чтобы описать физические процессы для данной геометрии поверхности.

Пористые структуры были получены в результате металл-стимулированного химического травления (MACE) на текстурированной поверхности (рис. 1 А), где наночастицы серебра действовали в качестве катализатора [1, 2]. В результате травления поры порядка 1 микрона образовались на гранях пирамид и в промежутках между ними (рис. 1 Б). Распределение электрического поля на такой

поверхности моделировалось в математическом пакете COMSOL Multiphysics.

Условия и методы исследования

При построении модели нужно было учитывать два фактора. Первый заключался в том, что для получения результатов наглядного характера необходима реализация 3D модели поверхности кремния и объема среды нахождения данной подложки. Все моделирования осуществлялись в программном пакете КОМПАС-3D (рис. 2 А). Второй факт заключался в том, что после химических реакций на поверхности кремния видно, что помимо «щелевидных» пор на стыках пирамид, возникают поры также и на самих гранях. Можно заметить по масштабу снимка, полученного с растрового электронного микроскопа (рис. 1 А), что диаметры пор составляют 0,1–0,7 мкм. Поэтому приближенно сконструирована 3D модель структуры, где присутствуют и щелевидные поры, и хаотично расположенные микропоры на гранях пирамид (рис. 2 Б).

© Шишкин И. А., Лизункова Д. А., Латухина Н. В., 2020.

Шишкин Иван Александрович (shishkinivan9@gmail.com), магистрант физического факультета;

Лизункова Дарья Александровна (daria.lizunkova@yandex.ru),

старший преподаватель кафедры нанотехнологий;

Латухина Наталья Виленовна (natalat@yandex.ru),

доцент кафедры физики твёрдого тела и неравновесных систем Самарского университета, 443086, Россия, г. Самара, Московское шоссе, 34.

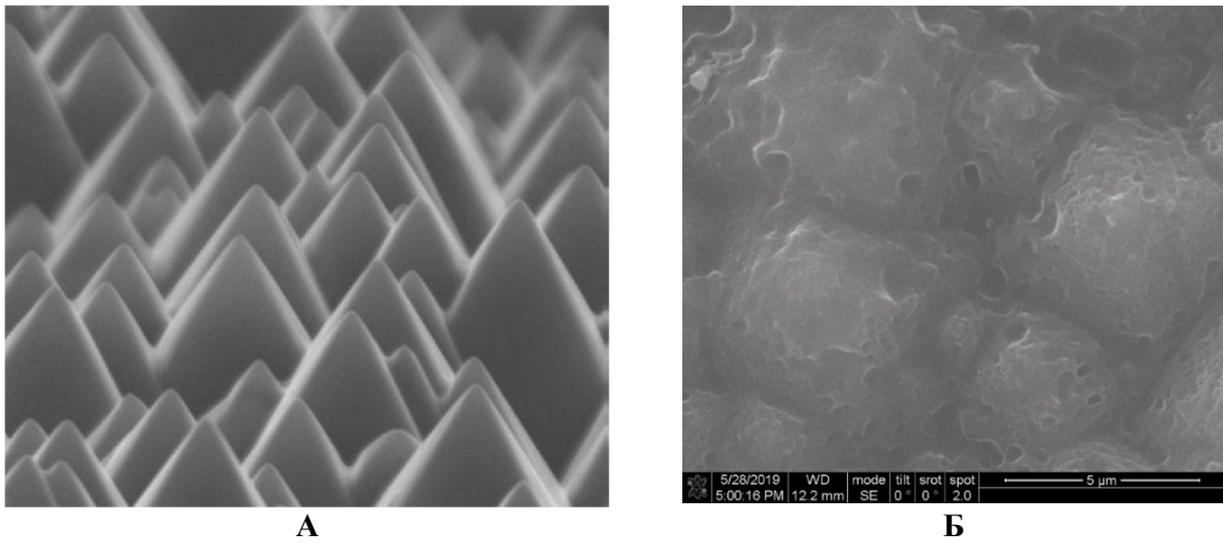


Рис. 1. РЭМ-изображение текстурированной поверхности кремния:
А – до металл-стимулированного химического травления,
Б – после металл-стимулированного химического травления

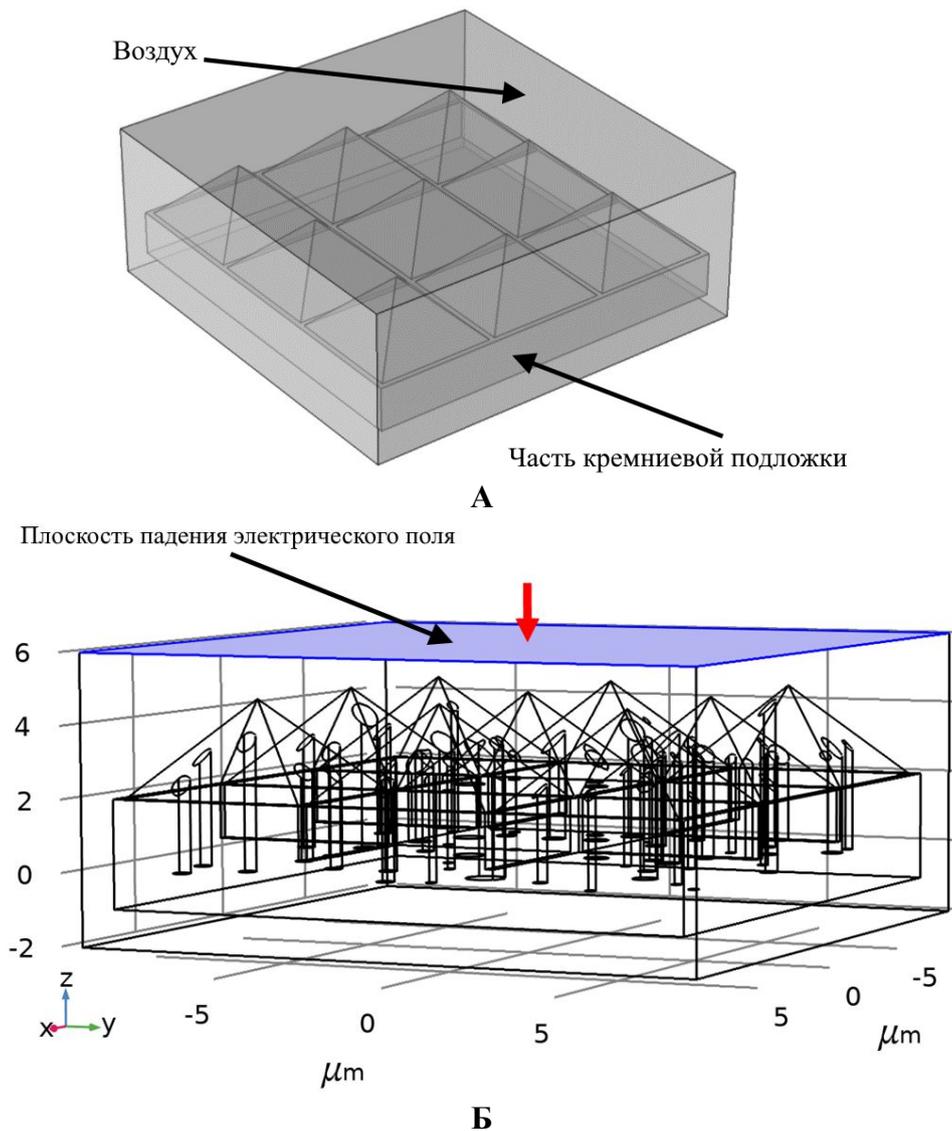


Рис. 2. 3D модель части текстурированной подложки кремния,
использующиеся в пакете Comsol Multiphysics

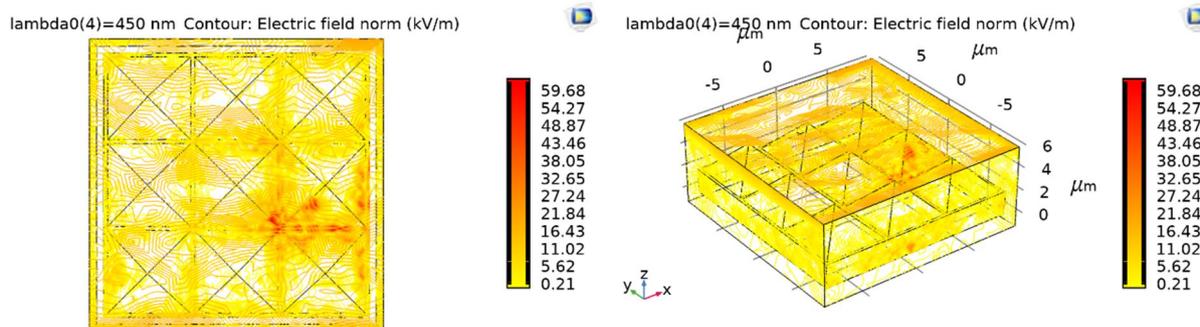


Рис. 3. Результаты моделирования распределения электрического поля на текстурированной подложке

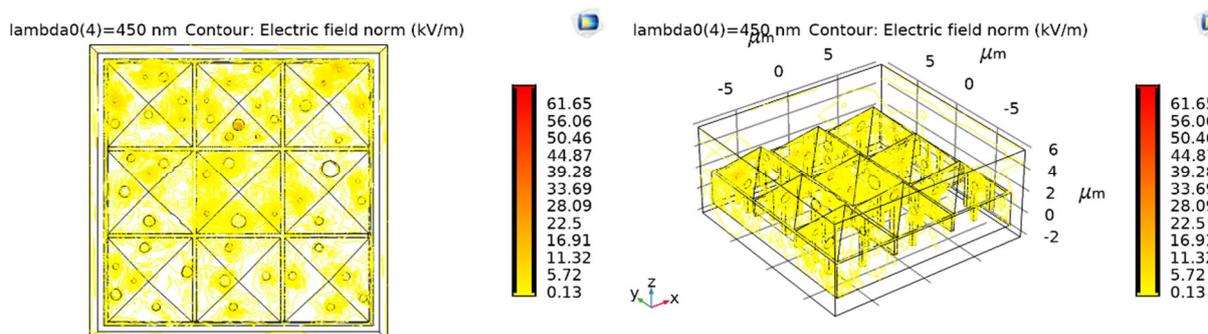


Рис. 4. Результаты моделирования распределения электрического поля на пористо-текстурированной подложке

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

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

По умолчанию в программном пакете уже прописаны оптические параметры, такие как волновой вектор (k_0) и диэлектрическая проницаемость (ϵ_r) материала для каждой среды. В нашем случае такими средами служат воздух и кремний. Симуляция распространения эл. поля, проведенная в программном пакете в области оптического диапазона (400–1000 нм), позволяет рассчитать распределение ближнего поля.

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

$$\mathbf{\Pi} = \frac{\int_{\partial\Omega} (\mathbf{E} - \mathbf{E}_1) \mathbf{E}_1}{\int_{\partial\Omega} \mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_1}$$

где $\mathbf{\Pi}$ – вектор Умова - Пойтинга. Поскольку модель находится в декартовой системе координат, то вектор падения $\mathbf{E}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Численным методом для решения поставленной задачи являлось построение сетки конечных элементов для всей системы. Размеры одного элемента сетки составляли от 0,1 до 5 мкм.

Результаты и их обсуждение

Результаты моделирования в программном пакете показаны на рис. 3 и 4. В случае, когда свет с длиной волны около 450 нм падает на текстурированную поверхность без пор, распределение электрического поля в основании текстурированной поверхности намного выше, чем на вершинах и гранях пирамид. При получении графиков отражения от той или иной структуры, обычно наблюдают наименьшее отражения в видимом диапазоне (450–550 нм), поэтому результаты моделирования распределения электрического поля на текстурированной подложке были взяты при длине волны 450 нм.

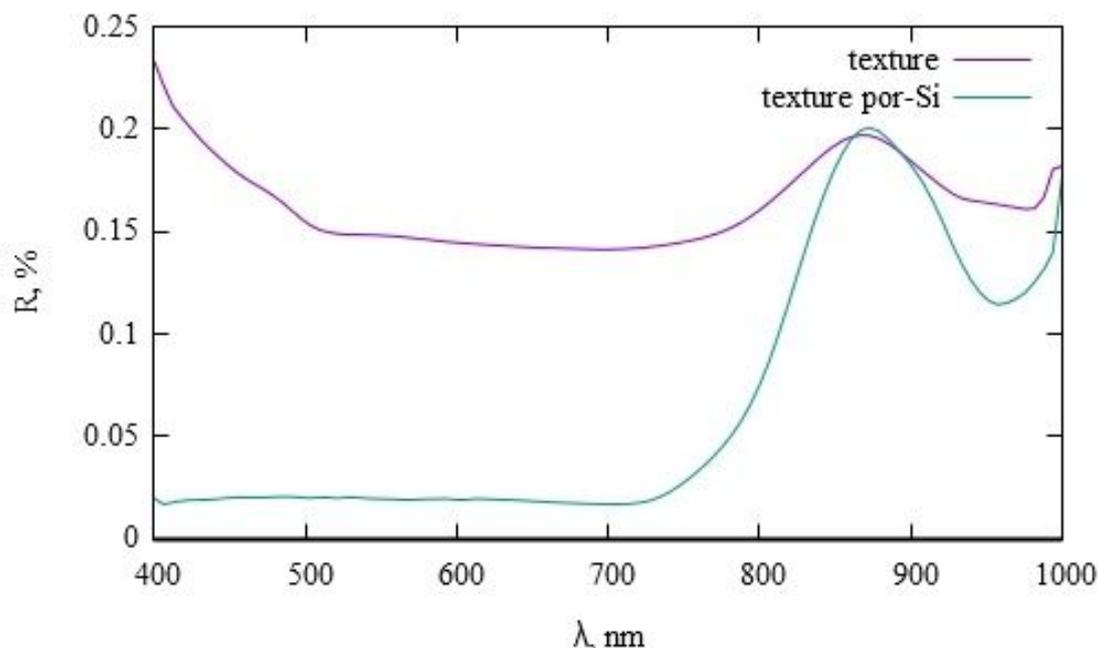


Рис. 5. Спектральные характеристики коэффициента отражения для текстурированной и пористо-текстурированной поверхности

Контурная карта распределения электрического поля (рис. 2) подтверждает, что текстурированная поверхность отражает свет между гранями пирамидок, тем самым увеличивает площадь поглощения света. При этом стоит учитывать и недостатки данной морфологии, а именно то, что свет может падать на поверхность при разных углах, это приводит к полному отражению, либо к «переотражениям» от граней пирамид. Все эти минусы можно наблюдать на самих контурных картах. Полное отражение света наблюдается на верхней плоскости объема воздуха. Многочисленные отражения от граней пирамидальной поверхности подтверждаются повышенным распределением эл. поля у основания подложки. Это связано с особенностями геометрии поверхности.

Ситуация меняется, когда поверхность пирамид покрыта микропорами. Электрическое поле равномерно распределено по всей поверхности, где видно, что в микроканалах высокая плотность эл. поля. Поры на поверхности граней пирамиды действуют как концентратор излучения, и, учитывая, что свет отражается на гранях пирамиды во время падения, мы получаем почти полное поглощение света. Симуляция распространения электрического поля наглядно подтверждает, что пористо-текстурированная поверхность может понизить коэффициент отражения до значения ниже 0,1 %.

Для проверки результатов моделирования исследованы экспериментальные зависимости коэффициента отражения кремниевых подложек размером 2,5 x 2,5 см. На рис. 5 показано, что в диапазоне длин волн от 400 до 750 нм наблюдается существенная разница в полученных кривых, где их разность составляет 0,1–0,15 %. В инфракрасном диапазоне пористая структура уже менее светочувствительна, поскольку размер пор в среднем составляет около 0,1–0,7 мкм, что меньше длины падающего излучения.

Заключение

Таким образом, исследования показали, что пористо-текстурированная поверхность кремния может служить хорошим решением для создания светочувствительных структур, которые смогли работать в оптическом диапазоне, а также и в ИК-области, учитывая сам факт того, что для прохождения волн выше 1000 нм необходимо проводить электрохимическое травление или МАСЕ при больших временах, для получения макропор. В таком случае можно добиться коэффициента отражения при значениях меньше 0,5 % при данных диапазонах.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Фонда содействия развитию малых форм

предприятий в научно-технической сфере № 12980ГУ/2018.

Литература

1. 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. № 12. С. 1654–1659.

2. Формирование кремниевых нанонитей методом металл-стимулированного химического травления и исследование их оптических свойств / А. В. Бондаренко, К. В. Гирель, С. А. Невзоров [и др.] // Доклады БГУИР. 2016. № 2 (96). С. 5–10.

3D MODEL OF ELECTRIC FIELD DISTRIBUTION IN A PORES-TEXTURED STRUCTURE

I. A. Shishkin, D. A. Lizunkova, N. V. Latukhina

In this article, we simulated the propagation of an electric field on the surface of a textured silicon structure. This made it possible to identify the optimal parameters of the porous layer, which contribute to a decrease in the reflection coefficient in the entire studied spectral range. Simulation of the distribution of the electric field was carried out in the COMSOL Multiphysics package. The results of modeling the distribution of the electric field showed that largely there is no full reflection. Most of the electric field is concentrated in micropores and on the verge of pyramids. This clearly confirms that a porous-textured surface with a disordered system of pores of different diameters can lower the reflection coefficient to a value below 0,1 %.

Key words: photosensitive structures, porous silicon, textured surface, MACE, COMSOL Multiphysics.

Статья поступила в редакцию 08.07.2020 г.

© Shishkin I. A., Lizunkova D. A., Latukhina N. V., 2020.

Shishkin Ivan Aleksandrovich (shishkinivan9@gmail.com), graduate student of the Physics Faculty;

Lizunkova Daria Aleksandrovna (daria.lizunkova@yandex.ru),

senior lecturer department of nanoengineering;

Latukhina Natalya Vilenovna (natalat@yandex.ru),

professor of the Solid State Physics and Nonequilibrium Systems Department of the Samara University, 443086, Russia, Samara, Moskovskoye Shosse, 34.