

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Пористый кремний представляет собой класс уникальных материалов, полученных за счет удаления доли кремния, в виде кластеров или отдельных атомов из объема монокристаллического кремния под электрохимическим или химическим воздействием. Пористый кремний обладает высокой физико-химической активностью при сохранении исходной монокристаллической структуры, что обуславливает широкие возможности его применения.

Рассмотрение физико-химических свойств пористого кремния с точки зрения модельных и физических экспериментов позволяет исследовать не только макроскопические параметры, но и рассматривать размерные эффекты в рамках квантовой физики и химии.

Исследование в области частотных характеристик модельных и физических структур пористого кремния является актуальной задачей физики полупроводниковых материалов. Пористый кремний удовлетворяет конструктивных и технологическим требованиям современной техники и электроники, является экономически целесообразным и продуктивным, в связи с результатами исследования представляют особый интерес.

Цель и задачи работы. Целью исследования являются поиск и изучение возможностей частотных характеристик структуры пористого кремния с позиции модельных и физических представлений.

Для достижения цели исследования производилось комплексное решение следующих основных задач:

- исследование частотных свойств пористого кремния в рамках эффективной среды на основе модели Максвелла-Гарнета;
- анализ спектральной зависимости фотоотклика слоя пористого кремния, различной степени пористости и окисления, насыщенного серебром;

- моделирование структуры фрагментов пористого кремния на основе квантово-механических расчетов;
- получение образцов пористого кремния, их исследование методом ИК–спектроскопии.

Объектом исследования является слои пористого кремния, полученные электрохимическим и химическим методами; слои и фрагменты пористого с различной степенью пористости, доли кислорода и серебра.

Предметом исследования служат вычислительный и практический эксперименты на основе модельных представлений расчета эффективной среды. База данных получена посредством комплексного исследования, включающего спектрофотометрию и атомно-молекулярное моделирование.

Теоретической и методологической базой исследования являются книги, учебные пособия, авторефераты, диссертации, анализ публикаций в области исследования.

Научная новизна исследования частотной зависимости пористого кремния с различной степенью пористости, стабилизацией водородом поверхностных связей и насыщением пор иными материалами с точки зрения квантовой физики и химии.

Практическая значимость работы заключается в том, что с помощью разработанной методики в сочетании с атомно-молекулярным моделированием возможно оказывать существенное влияние на ряд физико-химических свойств структуры пористого кремния и изделий на их основе.

Структура работы. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованных источников. Основная часть исследования изложена на 45 страницах, текст иллюстрирован 24 рисунками и 2 таблицами.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В первой главе - «Пористый кремний как предмет научных исследований» - описаны физико-химические свойства монокристаллического и пористого кремния, основные отличия и эффекты. Представлены спектр применения пористого кремния в науке и технике. Обозначены основные электрохимические и химические методы получения пористого кремния.

Во второй главе – «Исследование пористого кремния в рамках модели эффективной среды» - дается описание методики исследования пористого кремния с точки зрения сложного композита. Слой пористого кремния представлен в виде фрагментов кремния с различной степенью окисления в воздушной матрице. Описана и представлена в виде программного кода модель (Максвелла-Гарнетта) расчета слоя пористого кремния, согласно формуле 1.

$$\frac{\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon_g}{\varepsilon_{\text{eff}} + 2\varepsilon_g} = p \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_g}{\varepsilon_0 + 2\varepsilon_g} \quad (1)$$

где ε_0 – диэлектрическая проницаемость «ядро-оболочка»

Проведено исследование проводимости слоя пористого кремния с пористостью 80% и содержанием кислорода 10%, 30%, 60% и 90%, согласно формуле 2.

$$\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p) \quad (2)$$

где q – элементарный заряд,

n – концентрация электронов электропроводности,

p – концентрация дырок электропроводности,

μ_n – подвижность электронов,

μ_p – подвижность дырок.

Исследование в рамках эффективной среды позволило предположить, что увеличение пористости структуры приводит к уменьшению поглощения пористой

структуры и проявлению эффекта «голубого смещения. В зависимости от объемной доли диоксида в сложной системе «кремний - диоксид кремния - серебро» проводимость системы в коротко волновом диапазоне длин волн от 40 до 300 нм нестабильна.

В третьей главе - «Моделирование структуры фрагментов пористого кремния на основе квантовомеханических расчетов» - рассматриваются вопросы, касающиеся возможностей математического моделирования.

Проводится ознакомление с теорией функционала электронной плотности, программным пакетом Atomistix Toolkit QuantumWise и рядом зарубежных и отечественных профильных статей, на основе которых представлены основные параметры расчетов.

Описывается исследование влияния пористости и эффекты, связанные с заполнением пор, на плотность электронных состояний структуры и ее частотных свойства. Затронуты проблемы влияния состояния поверхности структуры и характера взаимодействия «наполнителя» на внешнее электромагнитное воздействие.

По результатам модельного эксперимента установлено, что образования химических связей Si-Ag в поре ведет к 4-х кратному увеличению потерь в веществе и формированию явления плазменного резонанса в области энергий 3-6 эВ. Присутствие серебра в поре частицы без образования связей Si-Ag не оказывает воздействия на оптические свойства кремниевой пористой структуры;

В четвертой главе – «Экспериментальное исследование пористого кремния» описаны режимы получения физических структур пористого кремния химическим и электрохимическим методами. Представлены результаты исследования образцов методом ИК–спектроскопии.

В заключении излагаются основные выводы:

- пористый кремний является материалом с управляемыми параметрами, зависящими непосредственно от режим его получения и термообработки;

- увеличение пористости структуры приводит:

1. к уменьшению поглощения пористой структуры в исследуемом частотном диапазоне;

2. проявляется эффект «голубого смещения», т.е. пик поглощения структуры смещается в область больших энергий

3. погрешность сопоставление значений эксперимента и расчета составило 30%.

- в зависимости от объемной доли диоксида в сложной системе «кремний - диоксид кремния - серебро» проводимость системы в коротко волновом диапазоне длин волн от 40 до 300 нм нестабильна;

- образования химических связей Si-Ag в поре ведет к 4-х кратному увеличению потерь в веществе и формированию явления плазменного резонанса в области энергий 3-6 эВ;

- присутствие серебра в поре частицы без образования связей Si-Ag не оказывает воздействия на оптические свойства кремниевой пористой структуры;

- спектральные пики поглощения в ИК-диапазоне соответствуют структуре пористого кремния.