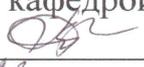


Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АМГУ»)

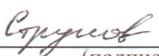
Факультет инженерно-физический
Кафедра физики
Направление подготовки 03.03.02 – Физика
Направленность (профиль) образовательной программы Физика конденсиро-
ванного состояния

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ
Зав. кафедрой
 Е. В. Стукова
« dd » 06 2018 г.

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

на тему: Исследование оптических свойств 100 нм пленок BaSi_2 , сформирован-
ных соосаждением Ba и Si

Исполнитель
студент группы 411 об

 19.06.18
(подпись, дата)

Д. О. Струков

Руководитель
доцент, канд. физ.-мат. наук

 20.06.18
(подпись, дата)

Д. В. Фомин

Нормоконтроль
доцент, канд. физ.-мат. наук

 21.06.18
(подпись, дата)

О. А. Агапьятова

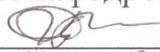
Благовещенск 2018

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АМГУ»)

Факультет инженерно-физический
Кафедра физики

УТВЕРЖДАЮ

Зав. кафедрой

 Е. В. Стукова
« 07 » 05 2018 г.

ЗАДАНИЕ

К выпускной квалификационной работе студента Струкова Дмитрия Олеговича

1. Тема выпускной квалификационной работы: Исследование оптических свойств 100 нм пленок BaSi_2 , сформированных соосаждением Ba и Si (утверждено приказом от

23.04.2018 № 914 – уч)

2. Срок сдачи студентом законченной работы (проекта) 14.06.2018

3. Исходные данные к выпускной квалификационной работе: оже-спектры и данные спектрофотометрии образца со сформированной низкоразмерной структурой методом твердофазной эпитаксии.

4. Содержание выпускной квалификационной работы (перечень подлежащих к разработке вопросов): провести литературный обзор методики расчета оптических постоянных, разработать программный модуль в среде Matlab для расчета оптических постоянных на основе спектрофотометрических данных, выполнить расчет спектральных зависимостей оптических постоянных из полученных спектрофотометрических данных, рассчитать ширину запрещенной зоны образца по краю собственного поглощения, провести анализ результатов электронной оже-спектроскопии.

5. Перечень материалов приложения: (наличие чертежей, таблиц, графиков, схем, программных продуктов, иллюстративного материала и т.п.) листинг про-

граммного модуля.

6. Консультанты по выпускной квалификационной работе (с указанием относящихся к ним разделов) нет

7. Дата выдачи задания 07.05.2018

Руководитель выпускной квалификационной работы: Фомин Дмитрий Владимирович, доцент, канд. физ.-мат. наук, доцент.

Задание принял к исполнению (дата): 07.05.2018 Струков
(подпись студента)

РЕФЕРАТ

Бакалаврская работа содержит 42 страницы, 13 рисунков, 3 приложения, 23 источника.

ОПТИЧЕСКИЕ ПОСТОЯННЫЕ, ТОНКИЕ ПЛЕНКИ, ШИРИНА ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ, СООТНОШЕНИЯ КРАМЕРСА-КРОНИГА, ТВЕРДОФАЗНАЯ ЭПИТАКСИЯ

В выпускной квалификационной работе представлены сведения о теоретической основе методики расчета оптических постоянных, результаты расчета и их анализ для полученного образца с тонкой пленкой, сформированной соосаждением Ba и Si методом твердофазной эпитаксии.

Целью работы является формирование и расчет спектров оптических постоянных образца, получаемого соосаждением Ba и Si методом твердофазной эпитаксии, а также определение ширины его запрещенной зоны.

В работе рассмотрено формирование пленки $BaSi_2$ соосаждением Ba и Si на Si (111) методом ТФЭ. Приведены результаты исследования полученного образца методами электронной оже-спектроскопии и спектрофотометрии. Рассчитаны спектральные зависимости оптических постоянных и определена ширина запрещенной зоны пленки $BaSi_2$ по краю собственного поглощения.

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|----|
| Введение | 5 |
| 1 Методы расчета оптических постоянных на основе соотношений Крамерса-Кронига | 7 |
| 1.1 Метод Крамерса-Кронига | 7 |
| 1.2 Разностный метод Крамерса-Кронига | 9 |
| 1.3 Множественный разностный метод Крамерса-Кронига | 9 |
| 2 Расчет оптических постоянных на основе рекуррентных соотношений | 11 |
| 2.1 Расчет для однослойной структуры | 11 |
| 2.2 Расчет для двухслойной структуры | 13 |
| 3 Электронная оже-спектроскопия | 16 |
| 3.1 Спектр вторичных электронов | 16 |
| 3.2 Оже-электронная эмиссия | 17 |
| 4 Формирование и исследование образцов | 20 |
| 4.1 Формирование образцов методом ТФЭ | 20 |
| 4.2 Анализ образцов методом ЭОС | 20 |
| 4.3 Анализ спектрофотометрических данных и расчет оптических постоянных | 21 |
| Библиографический список | 29 |
| Приложение А | 32 |
| Приложение Б | 34 |
| Приложение В | 40 |

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ, СОКРАЩЕНИЯ

ТФЭ – твердофазная эпитаксия;

ФЭП – фотоэлектронный преобразователь;

ЭОС – электронная оже-спектроскопия;

СВВ – сверхвысокий вакуум.

ВВЕДЕНИЕ

Альтернативная энергетика приобрела приоритетный характер в современном мире. В частности получила большое распространение солнечная энергетика как стабильный и неограниченный источник энергии. Все больше научных исследований посвящено поиску новых материалов для создания более эффективных фотоэлектрических преобразователей (ФЭП).

На сегодняшний день большинство ФЭП изготавливается из кремния, эффективность таких солнечных элементов достигает 25 % для ФЭП, изготовленных из монокристаллического кремния, и 22 % - для поликристаллического кремния [1]. Однако, возможный предел эффективности для внутреннего фотоэффекта обусловлен физическими свойствами материала, поэтому для дальнейшего повышения эффективности солнечных элементов необходим поиск новых материалов.

Одним из перспективных направлений является изготовление солнечных элементов на основе тонкопленочных структур различных соединений кремния с другими элементами. Весьма многообещающим выглядит дисилицид бария $BaSi_2$, ширина запрещенной зоны которого оценивается в 1,3 эВ, а коэффициент оптического поглощения порядка 10^5 см^{-1} [2,3]. На сегодняшний день уже известны успешные попытки изготовления ФЭП на основе структуры p- $BaSi_2$ /n-Si с коэффициентом полезного действия 9 % [4,5].

В лаборатории физики поверхности АмГУ так же ведутся исследования данного материала, ранее уже были успешно сформированы пленки $BaSi_2$ на кремнии методом твердофазной эпитаксии послойным (ТФЭ) осаждением Si и Ba с последующей рекристаллизацией [6,7]. В настоящей работе рассматривается возможность формирования пленки $BaSi_2$ одновременным соосаждением Si и Ba.

При изучении полупроводников большое внимание уделяется оптическим постоянным, в связи с их большой информативностью [8]. Зная показатель преломления n и коэффициент экстинкции k , можно получить наиболее полное

представление об электронной структуре вещества. Универсальными методами расчета спектральных зависимостей оптических постоянных из экспериментальных спектрофотометрических данных является методы, основанные на дисперсионных соотношениях Крамерса-Кронига [9,10].

Целью работы является формирование и расчет спектров оптических постоянных образца, получаемого соосаждением Ва и Si методом твердофазной эпитаксии, а также определение ширины его запрещенной зоны.

Задачи:

- 1) сформировать тонкие пленки BaSi_2 на кремнии соосаждением Ва и Si методом ТФЭ;
- 2) исследовать полученную низкоразмерную структуру методом электронной оже-спектроскопии (ЭОС);
- 3) определить ширину запрещенной зоны для полученного образца по краю собственного поглощения.

1 МЕТОДЫ РАСЧЕТА ОПТИЧЕСКИХ ПОСТОЯННЫХ НА ОСНОВЕ СООТНОШЕНИЙ КРАМЕРСА-КРОНИГА

1.1 Метод Крамерса-Кронига

Дисперсионные соотношения Крамерса-Кронига могут быть сформулированы для большого числа физических систем, для которых комплексная функция описывает линейный отклик системы на внешнее воздействие. Примером таких функций являются [9]:

а) комплексная диэлектрическая проницаемость

$$\hat{\varepsilon}(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega), \quad (1)$$

где ε_1 - действительная часть комплексной диэлектрической проницаемости, ε_2 - мнимая часть;

б) комплексный показатель преломления

$$\hat{n}(\omega) = n(\omega) + ik(\omega), \quad (2)$$

где n - показатель преломления, k - показатель поглощения;

в) комплексный коэффициент отражения

$$\ln(\hat{r}(\omega)) = \ln(\sqrt{R}) + i\theta, \quad (3)$$

где R - коэффициент отражения, θ - фаза отраженной волны.

Можно записать следующие соотношения [9]:

$$\begin{cases} R = |\hat{r}|^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}; \\ \operatorname{tg}\theta = \frac{2k}{n^2 + k^2 - 1}. \end{cases} \quad (4)$$

Выражая n и k , получаем:

$$\begin{cases} n = \frac{1 - R}{(1 - \sqrt{R})^2 + 4\sqrt{R} \sin^2 \frac{\theta}{2}} ; \\ k = \frac{2\sqrt{R} \sin \theta}{(1 - \sqrt{R})^2 + 4\sqrt{R} \sin^2 \frac{\theta}{2}}. \end{cases} \quad (5)$$

Также можно представить компоненты комплексной диэлектрической проницаемости через n и k :

$$\begin{cases} \varepsilon_1 = n^2 - k^2 ; \\ \varepsilon_2 = 2nk. \end{cases} \quad (6)$$

Таким образом, если известна одна из комплексных функций \hat{r} , $\hat{\varepsilon}$ или \hat{n} , то остальные могут быть вычислены из соотношений (1-6).

Для расчета оптических постоянных из соотношений (5) необходимо знать коэффициент отражения R и фазу отраженной волны θ . Коэффициент отражения устанавливается экспериментально, чтобы найти θ запишем для (3) дисперсионное соотношение Крамерса-Кронига:

$$\theta(\omega_0) = \frac{\omega_0}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln R(\omega)}{\omega_0^2 - \omega^2} d\omega. \quad (7)$$

Здесь и далее символ P означает, что интеграл берется в смысле главного значения. Численные значения частот ω представлены в виде соответствующих энергий электромагнитного излучения - эВ.

Очевидно, в силу технологических ограничений, нет возможности экспериментально получить спектр коэффициента отражения от 0 до ∞ . Для разрешения этой особенности представим абсолютное значение фазы отраженной волны в виде суммы:

$$\theta(\omega_0) = \theta_1(\omega_0) + \theta_2(\omega_0) + \theta_3(\omega_0), \quad (8)$$

где $\theta_2(\omega_0)$ - фаза, рассчитанная из экспериментальных данных, тогда $\theta_1(\omega_0)$ и $\theta_3(\omega_0)$ - вклад от неизмеренных низко- и высокоэнергетических областей спектра соответственно.

Для учета первого и последнего слагаемого используются различные методы экстраполяции. В простейшем случае неизмеренные области спектра экстраполируют в виде прямой, численно равной соответствующему граничному значению экспериментально измеренной области [9].

1.2 Разностный метод Крамерса-Кронига

Любой способ экстраполяции экспериментального спектра имеет погрешность, но существует возможность преобразовать выражение (7) таким образом, чтобы учесть систематическую погрешность вносимую экстраполяцией:

$$\frac{\theta(\omega_0)}{\omega_0} - \frac{\theta(\omega_1)}{\omega_1} = \frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln R(\omega)}{\omega_0^2 - \omega^2} d\omega - \frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln R(\omega)}{\omega_1^2 - \omega^2} d\omega, \quad (9)$$

где ω_1 - частота некоторой опорной точки спектра, $\theta(\omega_1)$ – значение фазы опорной точки, рассчитанная из экспериментальных данных.

Откуда для полной фазы имеем:

$$\theta(\omega_0) = \omega_0 \left(\frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{(\omega_1^2 - \omega_0^2) \ln R(\omega)}{(\omega_0^2 - \omega^2)(\omega_1^2 - \omega^2)} d\omega + \frac{\theta(\omega_1)}{\omega_1} \right). \quad (10)$$

Выражение (10) называется разностным интегралом Крамерса-Кронига, а расчет с использованием данного интеграла – разностным методом Крамерса-Кронига [9,10].

1.3 Множественный разностный метод Крамерса-Кронига

Если в разностном интеграле Крамерса-Кронига используются больше одной опорной точки, такой интеграл в общем случае будет называться множественным интегралом Крамерса-Кронига. Используя рассуждения, приведенные в [10], запишем такой интеграл для комплексного коэффициента отражения, учитывая выражение (7):

$$\sum_{i=0}^n \frac{(-1)^i \left(\frac{\theta(\omega_i)}{\omega_i} \right)}{\prod_{j=0}^{i-1} (\omega_i^2 - \omega_j^2) \prod_{j=i+1}^n (\omega_j^2 - \omega_i^2)} =$$

$$= \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^i \frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln R(\omega)}{\omega_0^2 - \omega^2} d\omega}{\prod_{j=0}^{i-1} (\omega_i^2 - \omega_j^2) \prod_{j=i+1}^n (\omega_j^2 - \omega_i^2)} = \frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln R(\omega)}{\prod_{i=0}^n (\omega_i^2 - \omega^2)} d\omega.$$
(11)

Выражая фазу отраженной волны, получаем:

$$\theta(\omega_0) = \omega_0 \left(\frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln R(\omega)}{\omega_i^2 - \omega^2} d\omega \right) +$$

$$+ \left(\prod_{j=1}^n (\omega_j^2 - \omega_0^2) \right) \sum_{i=1}^n \left((-1)^i \frac{\frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln R(\omega)}{\omega_i^2 - \omega^2} d\omega - \frac{1}{\omega_i} \theta(\omega_i)}{\prod_{j=0}^{i-1} (\omega_i^2 - \omega_j^2) \prod_{j=i+1}^n (\omega_j^2 - \omega_i^2)} \right),$$
(12)

или

$$\theta(\omega_0) = \omega_0 \left(\prod_{j=1}^n (\omega_j^2 - \omega_0^2) \right) \left(\frac{1}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\ln R(\omega)}{\prod_{i=0}^n (\omega_i^2 - \omega^2)} d\omega -$$

$$- \sum_{i=1}^n \left(\frac{(-1)^i \frac{\theta(\omega_i)}{\omega_0}}{\prod_{j=0}^{i-1} (\omega_i^2 - \omega_j^2) \prod_{j=i+1}^n (\omega_j^2 - \omega_i^2)} \right) \right),$$
(13)

где ω_0 - значение частоты рассчитываемой точки спектра, а $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$ - значение частот эталонных точек.

Чем больше используется опорных точек, тем ближе погрешность результата расчета к погрешности, с которой вычислены опорные точки, т.е. выше точность вычислений.

2 РАСЧЕТ ОПТИЧЕСКИХ ПОСТОЯННЫХ НА ОСНОВЕ РЕКУРЕНТНЫХ СООТНОШЕНИЙ

2.1 Расчет для однослойной структуры

Как отмечалось выше, для расчета оптических постоянных методом Крамера-Кронига необходимо знать значения n и k хотя бы в одной точки спектра. Это возможно сделать, рассчитав их в прозрачной области спектра с помощью рекуррентных соотношений на основе значений коэффициента отражения R и коэффициента пропускания T . Рассмотрим однослойную систему при нормальном падении света.

Коэффициенты отражения и пропускания связываются условием сохранения энергии:

$$\alpha + R + T = 1, \quad (14)$$

где α - коэффициент поглощения.

В случае непоглощающих материалов или, поглощением которых можно пренебречь ($n^2 \gg k^2$), значения оптических постоянных можно вычислить из известных формул Френеля:

$$R = \left(\frac{n - 1}{n + 1} \right)^2, \quad (15)$$

$$T = \frac{1 - R}{1 + R}, \quad (16)$$

где n - показатель преломления.

Для учета поглощения в веществе введем комплексный показатель преломления:

$$\tilde{n} = n + ik. \quad (17)$$

Таким образом:

$$R = \left| \frac{\tilde{n} - 1}{\tilde{n} + 1} \right|^2, \quad (18)$$

учитывая выражение (19), получаем:

$$R = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2}. \quad (19)$$

Однако, в реальном случае, в связи с многократными отражениями внутри слоев вещества, формула (19) не способна дать точного результата [11]. Учитывается это суммированием интенсивностей многократно отраженных лучей [12] (рисунок 1).

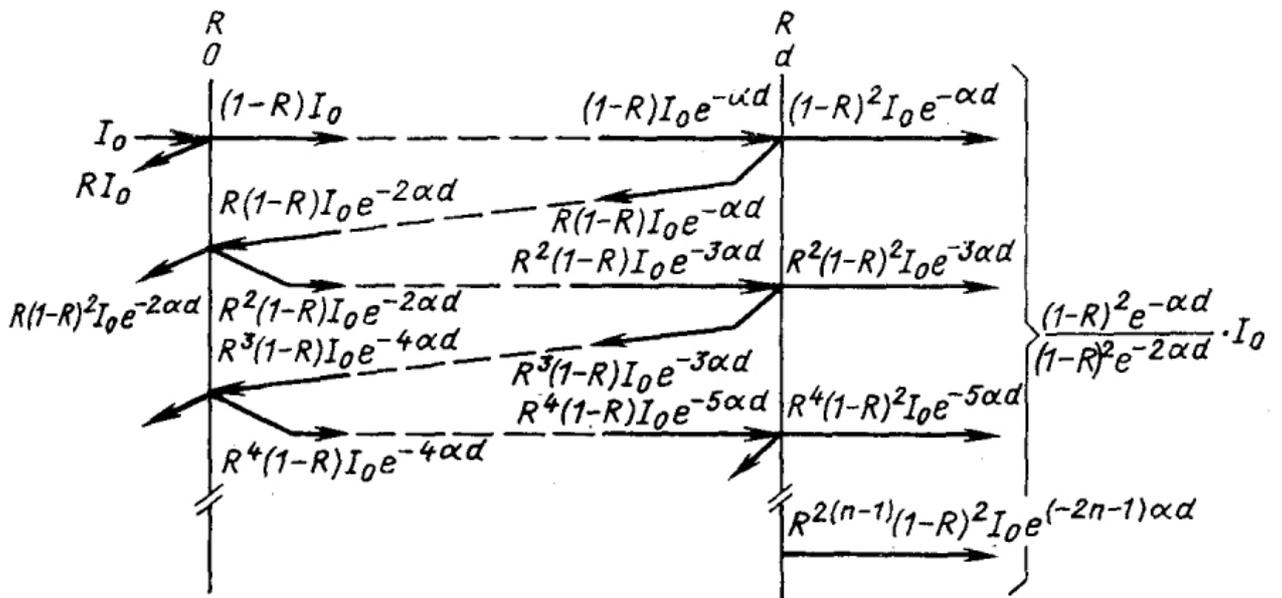


Рисунок 1 - Потoki энергии в системе с многократным внутренним отражением [12]

Очевидно, каждое внутреннее отражение ослабляет первичное излучение в одно и то же количество раз - является геометрической прогрессией. Используя формулу суммы геометрической прогрессии, приходим к формуле коэффициента пропускания однослойной системы с многократным внутренним отражением [13]:

$$T = \frac{(1 - R_s)^2 e^{-ax}}{1 - R_s^2 e^{-2ax}}. \quad (20)$$

Коэффициент отражения будет складываться из отражения от передней и многократного отражения внутри слоя [13]:

$$R = R_1 + \frac{(1 - R_1)^2 R_1 e^{-2ax}}{1 - R_1^2 e^{-2ax}}, \quad (21)$$

где a - коэффициент поглощения, x - толщина слоя, R_1 - коэффициент преломления на границе раздела среда-воздух и соответствующий формуле (19).

Коэффициент экстинкции находится по формуле [13]:

$$k = \frac{\lambda a}{4\pi}, \quad (22)$$

где λ - длина волны электромагнитного излучения.

Решая систему уравнений (19-22), находим искомые значения оптических постоянных.

2.2 Расчет для двухслойной структуры

Теперь рассмотрим систему пленка-подложка. Имеет место три границы раздела сред: воздух-пленка, пленка-подложка, подложка-воздух. Многократные отражения будут происходить как внутри пленки, так и внутри подложки (рисунок 2).

Учитывая эти обстоятельства, коэффициент пропускания принимает вид:

$$T = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)(1 - R_{12})e^{-ax - a_s x_s}}{(1 - R_{12} R_2 e^{-2a_s x_s})(1 - R_{12} R_1 e^{-2ax})} \times \frac{1}{\left(1 - \frac{(1 - R_{12})^2 R_1 R_2 e^{-2ax - 2a_s x_s}}{(1 - R_{12} R_2 e^{-2a_s x_s})(1 - R_{12} R_1 e^{-2ax})}\right)}. \quad (23)$$

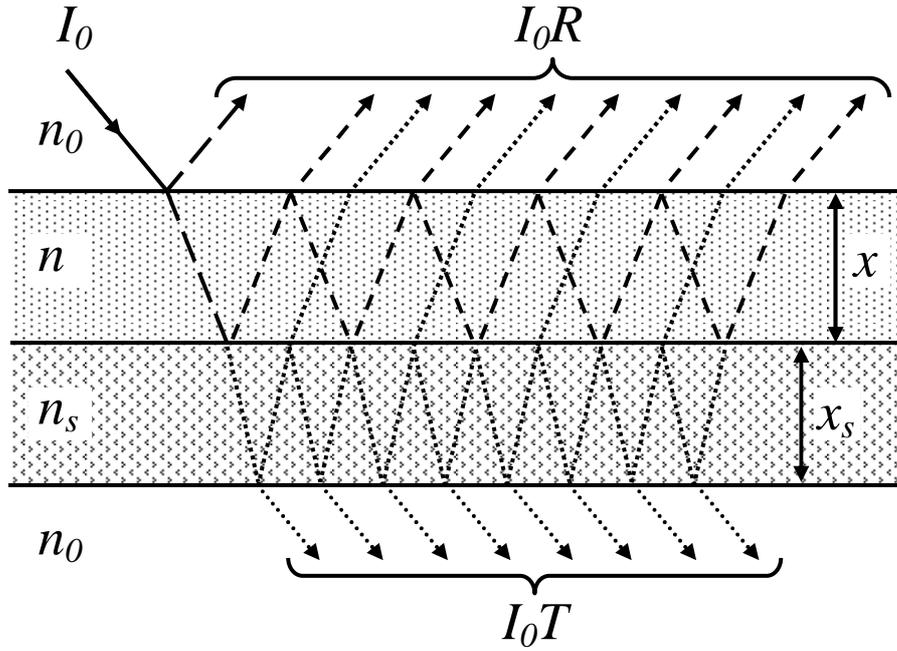


Рисунок 2 - Схема хода волн в системе пленка-подложка

Коэффициент отражения будет складываться из трех слагаемых: отражение от пленки, подложки и задней грани подложки. Последнее слагаемое для удобства выразим через коэффициент пропускания. Таким образом, получаем:

$$R = R_1 + \frac{(1 - R_1)^2 R_{12} e^{-2ax}}{(1 - R_{12} R_1 e^{-2ax})} + \frac{TR_2(1 - R_{12})(1 - R_1)e^{-ax - a_s x_s}}{(1 - R_{12} R_1 e^{-2ax})(1 - R_2)}, \quad (24)$$

$$R_1 = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2}, \quad (25)$$

$$R_2 = \frac{(n_s - 1)^2 + k_s^2}{(n_s + 1)^2 + k_s^2}, \quad (26)$$

$$R_{12} = \frac{(n - n_s)^2 + (k - k_s)^2}{(n + n_s)^2 + (k + k_s)^2}, \quad (27)$$

где: R_1 - коэффициент отражения от пленки;

R_2 - коэффициент отражения от подложки;

R_{12} - коэффициент отражения от границы пленка-подложка;
 R - суммарный коэффициент отражения системы пленка-подложка;
 T - суммарный коэффициент пропускания системы пленка-подложка;
 n - показатель преломления пленки;
 n_s - показатель преломления подложки;
 a - коэффициент поглощения пленки;
 a_s - коэффициент поглощения подложки;
 k - коэффициент экстинкции пленки;
 k_s - коэффициент экстинкции подложки;
 x - толщина пленки;
 x_s - толщина подложки.

Если оптические постоянные подложки, а также толщины пленки и подложки известны, то система уравнений (23-27) сводится к двум неизвестным - оптическим постоянным пленки n и k .

Рассмотренная модель предполагает, что исследуемые образцы оптически однородны и изотропны. Также не учитывается рассеяние света и явление люминесценции, что может быть причиной ошибок при расчете оптических постоянных некоторых материалов, в частности металлических пленок [14].

3 ЭЛЕКТРОННАЯ ОЖЭ-СПЕКТРОСКОПИЯ

3.1 Спектр вторичных электронов

При облучении твердого тела моноэнергетическими электронами с энергией E_p , на типичном спектре вторичных электронов $N(E)$ (рисунок 3) можно выделить характерные пики [15]:

- 1) пик упруго рассеянных электронов с энергией E_p ;
- 2) пик истинных вторичных электронов в области энергий $E=0$, хвост которого простирается вплоть до E_p ;
- 3) слабые пики в районе энергий от $E=0$ до E_p .

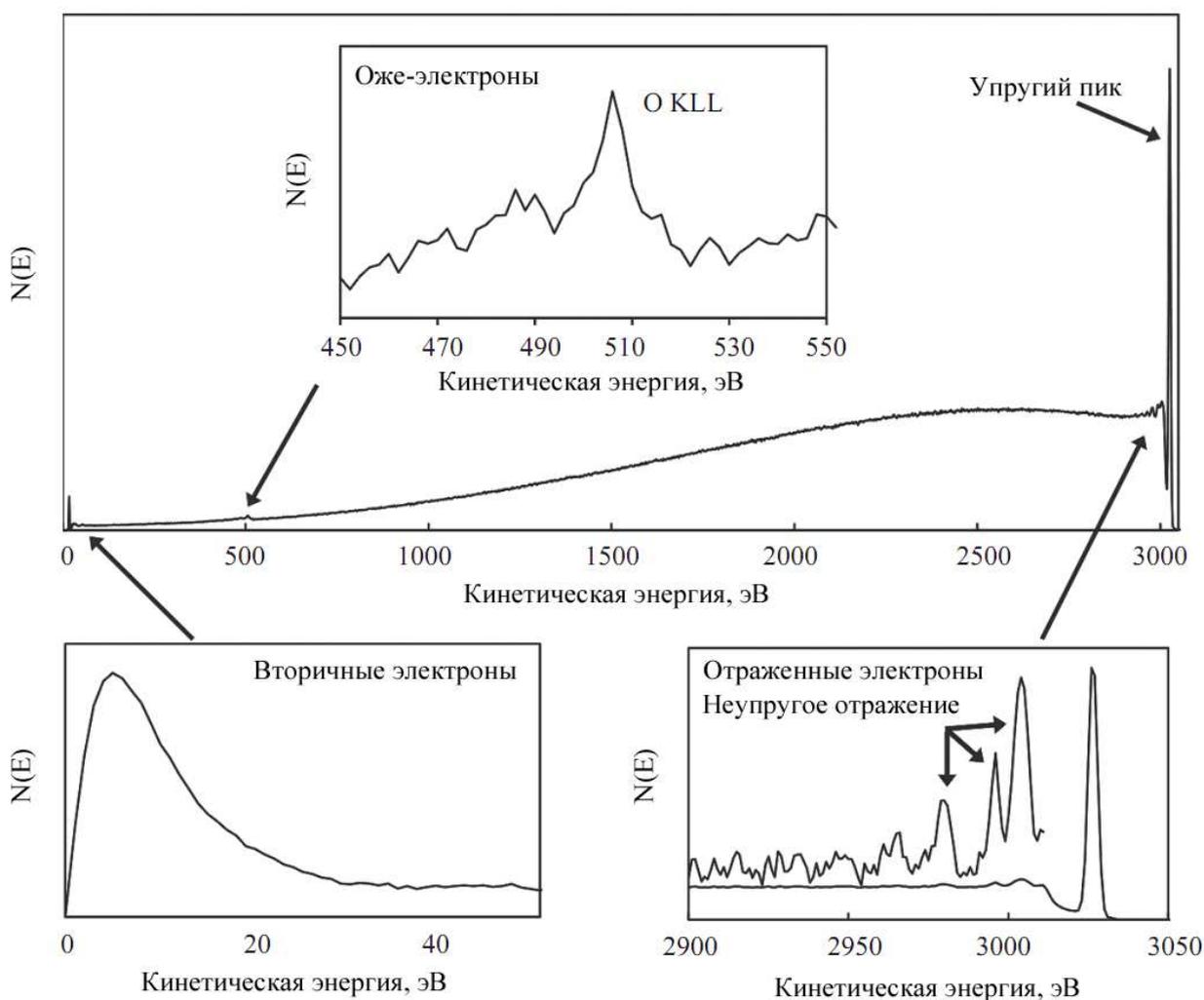


Рисунок 3 - Спектр кинетической энергии электронов, испущенных алюминиевым образцом при облучении первичными электронами с энергией 3 кэВ [16]

Как можно видеть, в разных частях спектра имеется несколько различных типов излучения. В дополнение к этому существует фоновое излучение, которое образует континуум. Точная форма спектра изменяется в зависимости от образца и энергии пучка, но всегда есть фоновое электронное излучение.[17] Как правило, электроны, излучаемые с энергией менее 50 эВ, называются истинно вторичными электронами, а те, которые испускаются с энергией более 50 эВ (исключая оже-электроны), называются упруго отраженными электронами [16].

Электроны, образующие первичный пучок, проходя через образец, взаимодействуют с атомами или ионами, вызывая все типы излучения. Вероятность, что каждый тип излучения будет происходить, будет отличаться в зависимости от энергии пучка и характера материала. Однако, регистрируемые электроны происходят не из всего объема, потому что в процессе движения происходят потери ими энергии внутри твердого тела, ослабляя пучок испускаемых частиц и предотвращая выход многих из них из глубин твердого тела [16].

Используемый диапазон кинетических энергий для анализа обычно составляет от 100 до 3000 эВ. Это означает, что длина свободного пробега электронов обычно находится в диапазоне от 0,5 до 5 нм, поэтому для любого заданного пика в спектре максимальная возможная глубина, из которой приходят 95 процентов электронов, способствующих этому пику, составляет примерно 15 нм. Поэтому можно видеть, что все обнаруженные оже-электроны испускаются из узкой области в верхней части основного объема возбуждения, показанной на рисунке 4. Именно по этой причине электронная оже-спектроскопия является методом анализа поверхности, материал образца эффективно поглощает оже-электроны, испускаемые атомами в объеме [16].

3.2 Оже-электронная эмиссия

Оже-электронная эмиссия является результатом релаксационного процесса после возбуждения атома бомбардировкой первичным пучком электронов, проиллюстрированного в левой части рисунка 5, которая оставляет дырку (отсутствие электрона) на глубоком энергетическом уровне, в данном случае на

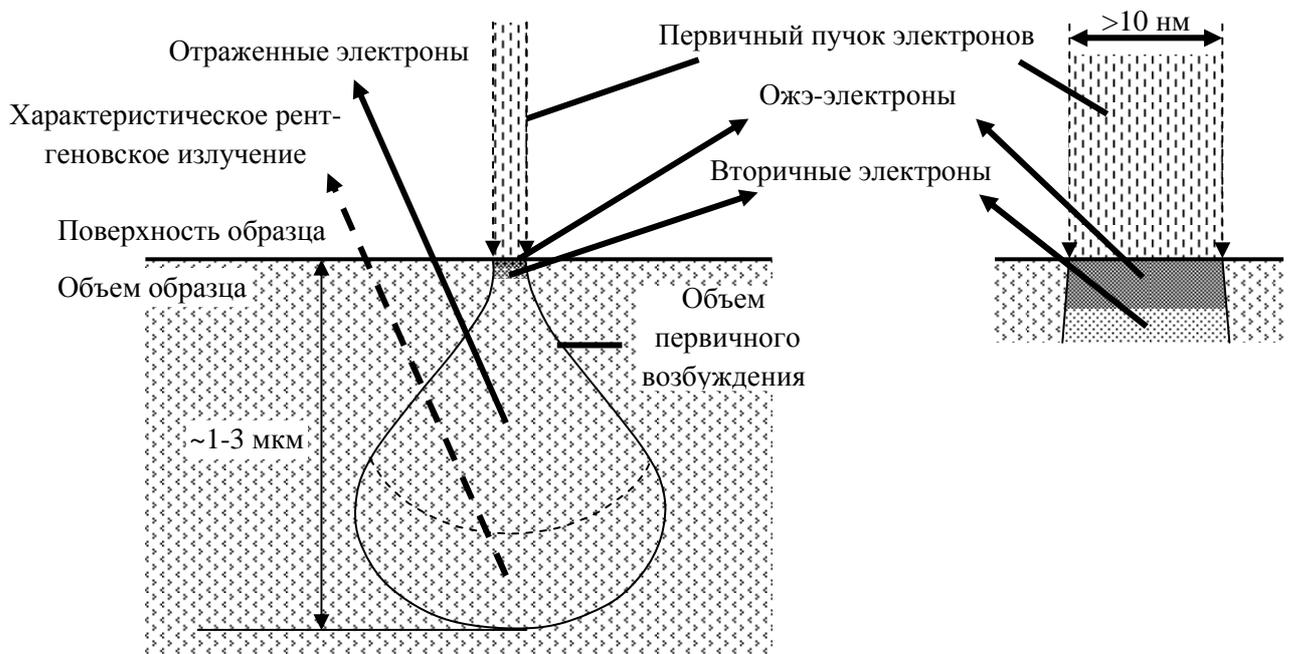


Рисунок 4 - Схематическое изображение, иллюстрирующее происхождение различных видов излучения, возникших в результате облучения твердого тела электронами [16]

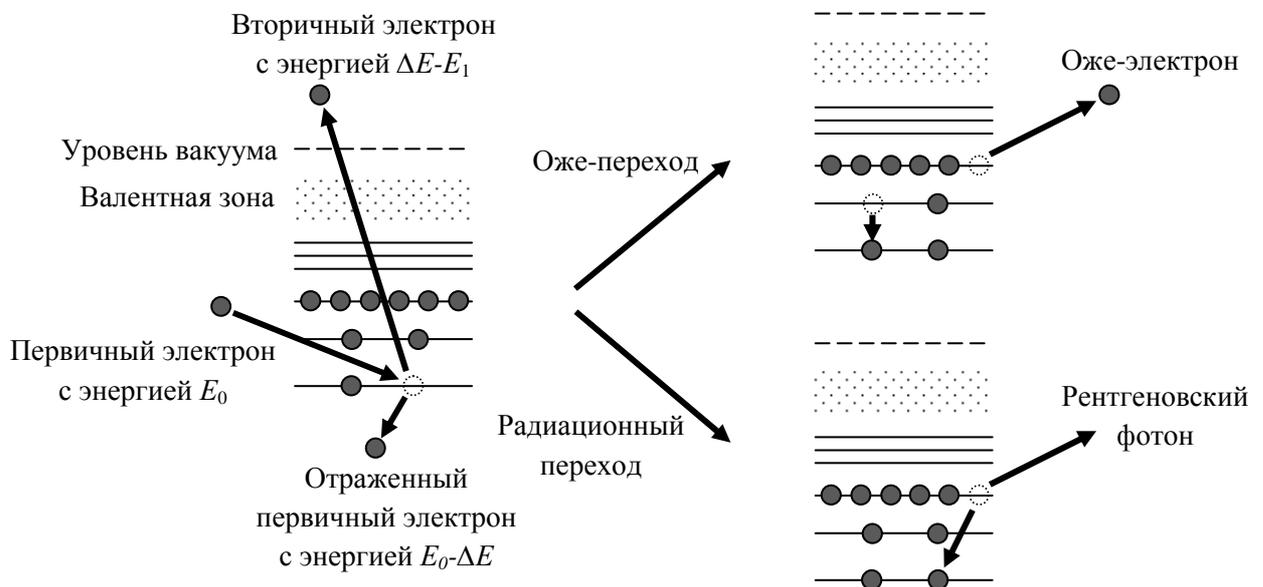


Рисунок 5 - Схематическая диаграмма, иллюстрирующая процесс образования оже-электрона и испускание фотона характеристического излучения [16]

уровне К. После выброса вторичного электрона атом превращается в ион, кото-

рый находится в возбужденном состоянии и будет релаксировать до основного. Два механизма такой релаксации приведены на рисунке 5 (справа). Одним из них является выброс оже-электрона. Электрон от более высокого уровня (например, уровня L) занимает место дырки, и третий электрон (например, другой L-электрон), получив энергию в результате перехода предыдущего, покидает атом. Этот третий электрон называется оже-электроном. Альтернативный режим релаксации для электрона на более высоком уровне при переходе в образованную вакансию (дырку) - испускание рентгеновского фотона [16].

Кинетическая энергия выброшенного электрона зависит только от трех уровней энергии и не зависит от энергии первичного пучка, если предположить, что электрон первичного пучка имеет достаточную энергию, чтобы вызвать первоначальную ионизацию. Оже-процесс всегда является трехэлектронным, если игнорировать первичный электрон, который инициирует процесс. Также исходный возбужденный ион может быть получен рентгеновскими лучами, поэтому пики оже-электронов очень часто появляются в спектрах рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии [16].

4 ФОРМИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗЦОВ

4.1 Формирование образцов методом ТФЭ

Образец был сформирован в сверхвысоковакуумной (СВВ) камере прибора РНІ-590, оснащенной оже–анализатором типа «двухпролетное цилиндрическое зеркало». Формирование пленок происходило при давлении в СВВ камере порядка 10^{-7} Па.

Подложка была изготовлена из промышленной шайбы КЭФ-100 Si(111) с удельным сопротивлением 5-15 Ом·см. Перед её помещением в СВВ камеру были проведены стандартные методы очистки. После установки образца в камеру и достижения рабочего давления была проведена процедура температурной очистки при 600 °С в течение 6 часов с последующим кратковременным высокотемпературным прогревом при температуре 1250 °С 3 раза по 3 секунды.

После была проведена калибровка скоростей осаждения источников кремния и бария с помощью датчика на основе кварцевого резонатора и измерительного прибора Sycon Instruments, позволяющего определять толщину пленки с точностью до 0,1 нм [18].

Пленка формировалась методом твердофазной эпитаксии в режиме соосаждения Si и Ba в соотношениях скоростей осаждения 2:3. Толщина пленки составила порядка 100 нм.

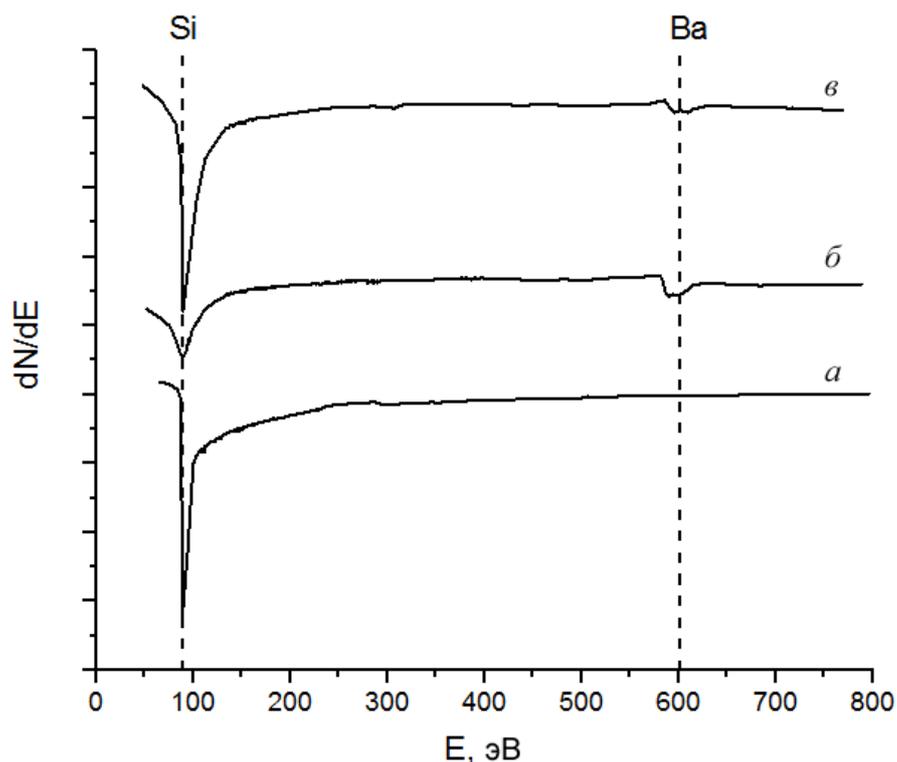
Заключительным этапом являлась её рекристаллизация при температуре 800 °С в течение 1 часа.

4.2 Анализ образцов методом ЭОС

На рисунке 6 приведены оже-спектры полученные на каждом этапе формирования тонкой пленки: после очистки подложки, после соосаждения Si и Ba, а также после рекристаллизации.

Анализ графиков проводился методом сравнения с эталонными оже-спектрами из справочных данных, приведенных в приложении А.

После этапа соосаждения Si и Ba (рисунок 6,б), можно наблюдать появление двойного пика в области энергий 600 эВ, что соответствует наличию бария



а) после очистки подложки, *б)* после соосаждения Si и Ba,
в) после рекристаллизации

Рисунок 6 - Оже-спектры образца

в поверхностном слое исследуемого образца. На рисунке 6,в можно видеть результат заключительного этапа формирования пленки – её рекристаллизацию при температуре 800 °С.

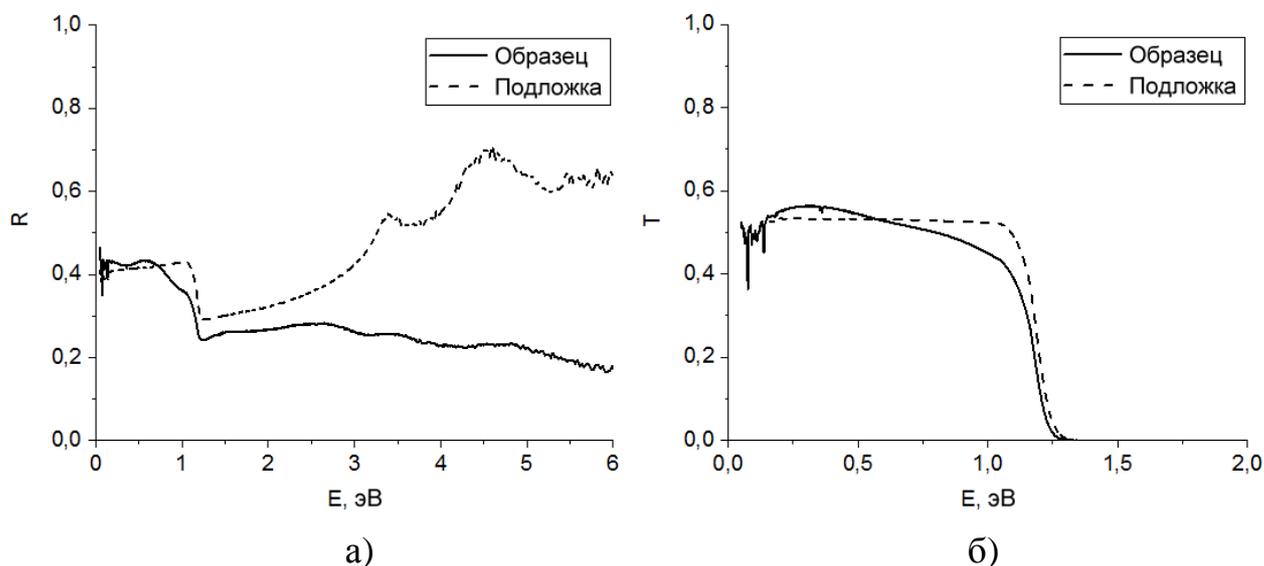
Таким образом, анализ спектров оже-электронов образца показал, что сформированная пленка не содержит значительного количества посторонних примесей в её поверхностном слое, при этом на графиках отчетливо видны обратные пики Si и Ba.

4.3 Анализ спектрофотометрических данных и расчет оптических постоянных

Оптический анализ полученного образца был проведен с помощью спектрофотометра Hitachi U-3010. Данная модель оснащена интегрирующей сферой, позволяющая учитывать не только зеркально отраженный свет, но и диффузно рассеянную составляющую, что дает возможность исследовать образцы с

матовой поверхностью.

На рисунке 7 приведены спектры коэффициента отражения R и пропускания T , которые были сняты для полученного образца.



а) коэффициент отражения R и б) коэффициент пропускания T

Рисунок 7 - Спектры для образца и чистой подложки

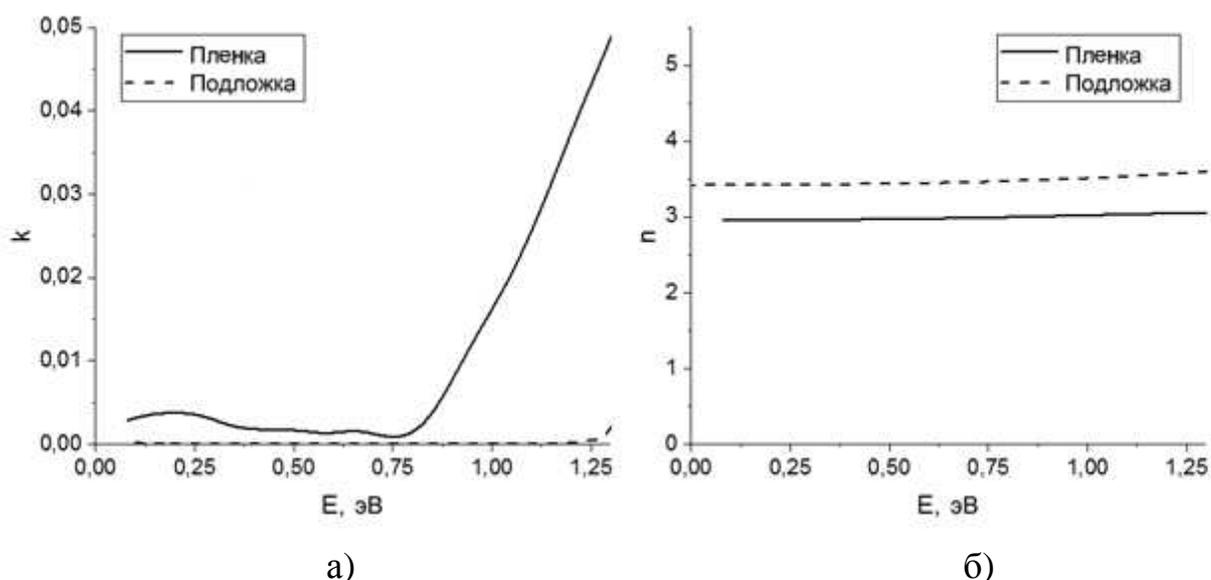
В соответствии с вышеизложенной теоретическим обзором методики расчета, вычисления спектров оптических постоянных проводилось в два этапа:

- 1) расчет оптических постоянных для прозрачной области спектра;
 - а) вычисление оптических постоянных подложки по формулам (19-22);
 - б) вычисление оптических постоянных для пленки по формулам (23-27);
- 2) расчет оптических постоянных для всего спектра с помощью разностного интеграла Крамерса-Кронига по формулам (5,10).

С целью автоматизации расчета были разработаны программные модули в среде MatLab, реализующие данный алгоритм. Листинг программ приведен в приложениях Б и В.

Результаты расчета n и k для чистой подложки и сформированной пленки

приведены на рисунке 8.



а) коэффициент экстинкции k , б) показатель преломления n

Рисунок 8 – Рассчитанные спектры оптических постоянных для чистой подложки и пленки

На рисунке 8,а в ИК области спектра отчетливо видно плато, образованное многократным отражением от граней тонкой пластинки подложки, в случае исследования достаточно толстых образцов данного уступа на графике коэффициента отражения не наблюдается. Таким образом, увеличение коэффициента отражения за счет геометрии образца, приведет к ошибочным результатам при решении методом Крамерса-Кронига в этой области спектра, чтобы исключить влияние многократного отражения внутри подложки пересчитаем прозрачную область из уже полученных значений n и k , так как если бы исследовался достаточно массивный образец.

Для этого исключим последнее слагаемое в формуле (24), получим:

$$R = R_1 + \frac{(1 - R_1)^2 R_{12} e^{-2ax}}{(1 - R_{12} R_1 e^{-2ax})}. \quad (28)$$

Результат восстановленного графика по формуле (28) представлен на рисунке 9.

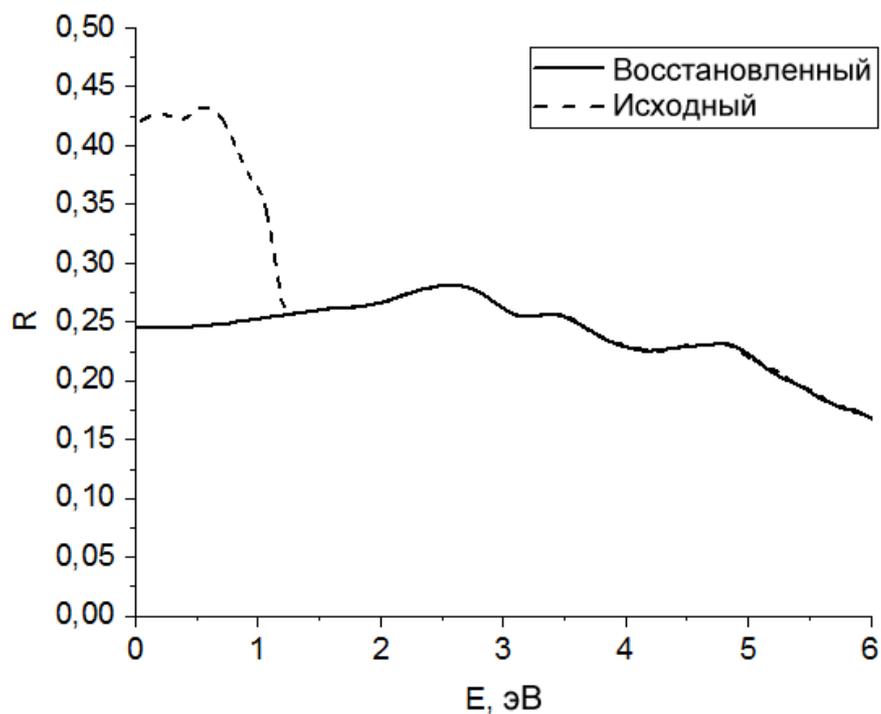


Рисунок 9 - Исходный и восстановленный спектр коэффициента отражения

Результат расчета оптических постоянных образца, проведенного методом Крамерса-Кронига, приведен на рисунке 10.

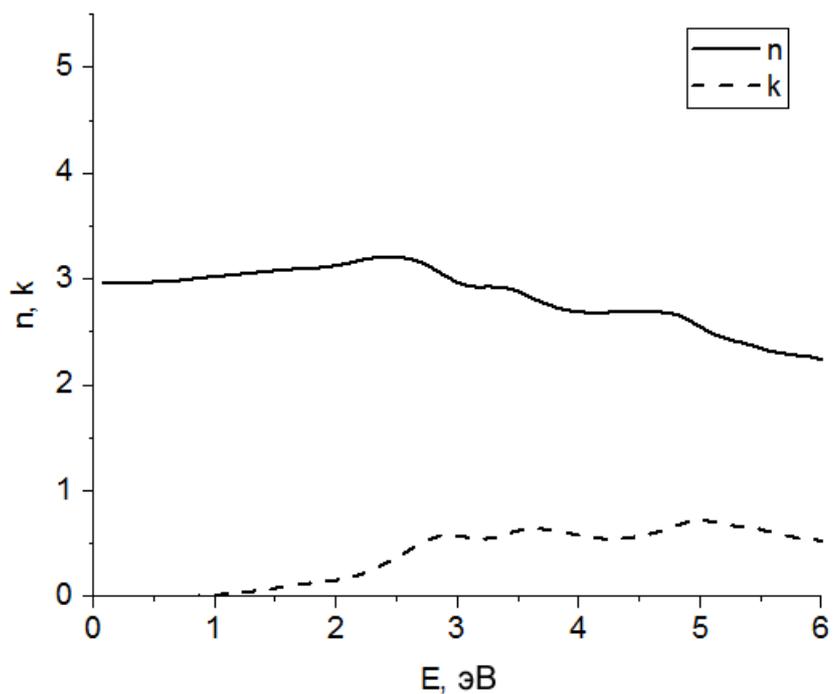


Рисунок 10 - Спектры оптических постоянных n и k образца

Также для сравнения приведем спектры оптических постоянных для монокристаллов Si и BaSi₂, взятые из литературных источников [9] и [19] (рисунок 11).

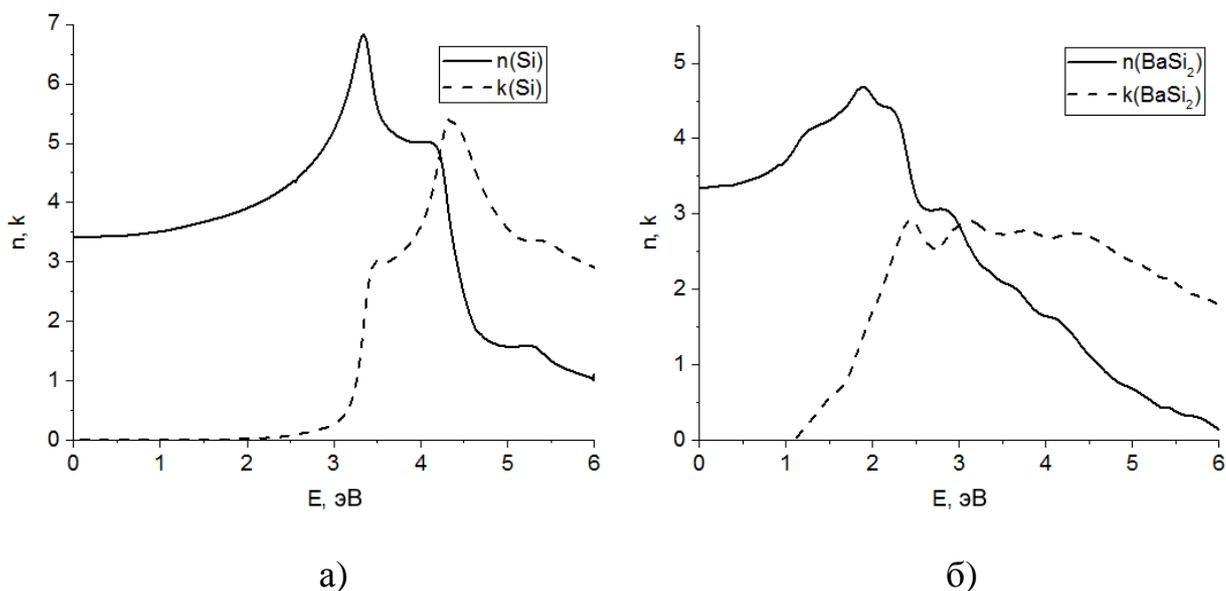


Рисунок 11 - Спектры оптических постоянных n и k чистых монокристаллов Si [9] и BaSi₂ [19]

Очевидно, что данные расчета сильно занижены численно, это может объясняться влиянием множества факторов: полученная пленка является поликристаллической, в процессе транспортировки и хранения в атмосфере образуется оксидная пленка на поверхности, в модели не учтено рассеяние на поверхности и в объеме образца, также границы раздела представлены в виде идеальной плоскости, в реальном случае в виду процессов диффузии стоит ожидать образование переходных слоев конечной толщины и др.

Все это может приводить к количественным ошибкам расчета, однако в данном случае нас интересует только качественная зависимость. Рассчитаем спектры квадрата коэффициента поглощения из данных приведенных на рисунках 10 и 11 и для удобства сравнения наложим в произвольном масштабе (рисунок 12).

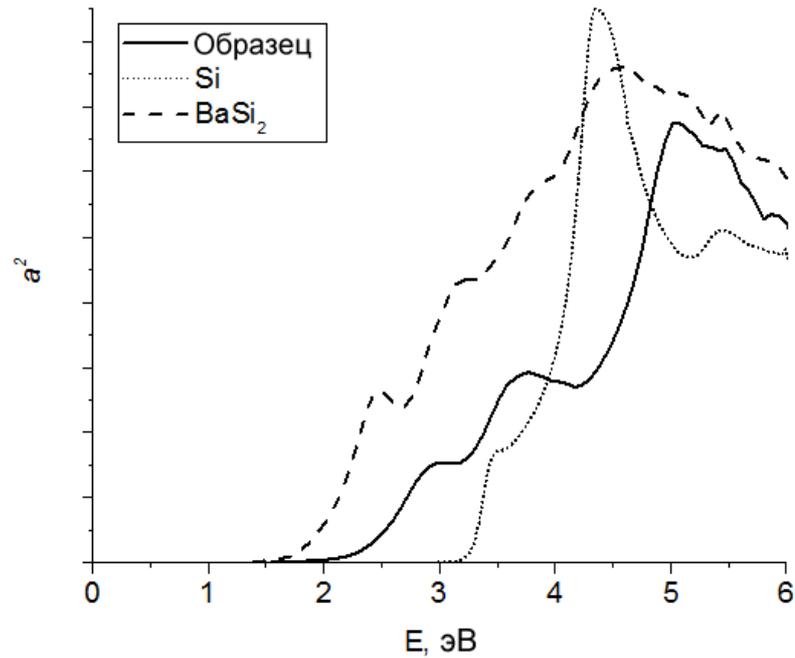


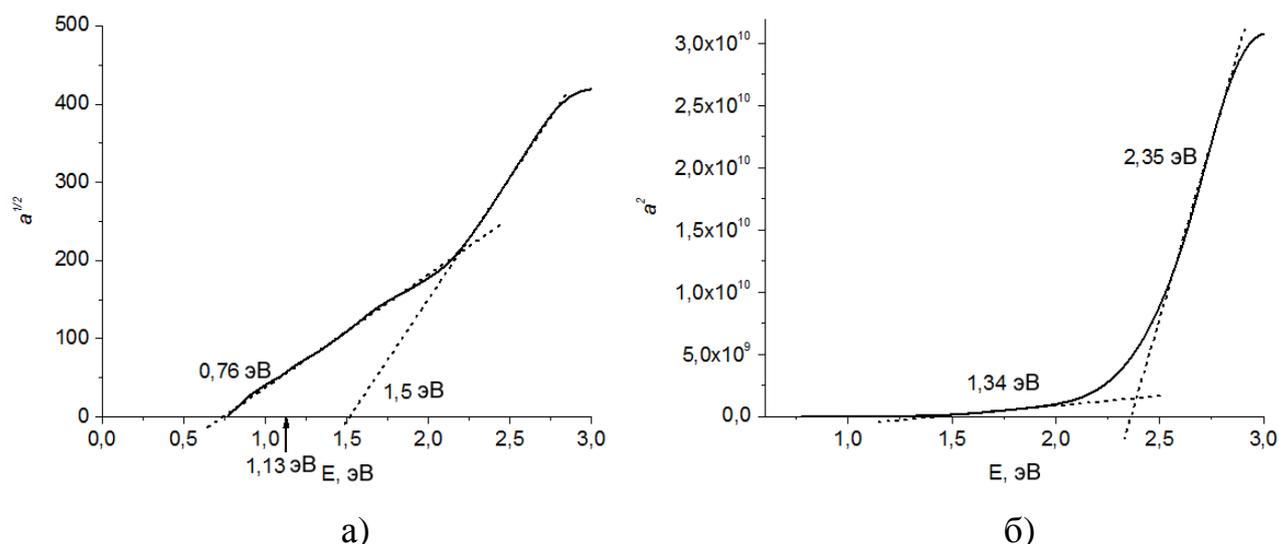
Рисунок 12 - Спектры квадрата коэффициента поглощения образца, Si и BaSi₂

Из рисунка 12 очевидно, что смещение спектра коэффициента поглощения в низкоэнергетическую сторону относительно кремния обусловлено наличием вещества иной электронной структуры, нежели монокристалл кремния. Так же можно отметить вблизи границы поглощения большое качественное сходство зависимости коэффициентов поглощения исследуемого образца и монокристалла BaSi₂ с небольшим смещением в высокоэнергетическую сторону.

Для определения ширины запрещенной зоны образца рассмотрим его спектр коэффициента поглощения более подробно вблизи края оптического поглощения (рисунок 13).

Экстраполируя прямолинейный участок зависимости $a^2 = f(h\nu)$ до пересечения с осью абсцисс, можно определить величину запрещенной зоны для прямых переходов, в случае непрямозонных переходов запрещенная зона определяется как среднее между значениями двух соседних пересечений прямолинейных отрезков с осью абсцисс зависимости $a^{\frac{1}{2}} = f(h\nu)$ [20].

Из анализа зонной структуры BaSi₂ можно отметить, что полученное значение непрямого перехода 1,13 эВ на рисунке 13,а близко к теоретическим дан-



а) квадратный корень и б) квадрат коэффициента поглощения

Рисунок 13 - Спектры зависимостей коэффициента поглощения для образца вблизи края собственного оптического поглощения

ным ширины запрещенной зоны тонкопленочного BaSi_2 [21]. Для орторомбической формы BaSi_2 прямозонные переходы лежат в областях энергий 1,23-1,3 эВ [22,23], что также хорошо согласуется с полученным значением прямого перехода на рисунке 13,б.

Похожие результаты были получены ранее для другой серии образцов и подробно описанных в [6], где помимо оптического исследования был проведен рентгеноструктурный анализ, подтвердивший наличие BaSi_2 в полученных образцах. Это позволяет предположить, что и в данном случае было образование в пленке орторомбической структуры BaSi_2 .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты проведенной работы:

1. Установлено, что использование метода ТФЭ и соосаждения Si и Ba приводят к формированию низкоразмерных структур $BaSi_2$ на кремниевой подложке.

2. Показано методом ЭОС, что поверхность, как очищенной кремниевой подложки, так и сформированной на ней пленки не содержат сколько-нибудь значительного количества нежелательных примесей. На спектрах оже-электронов отчетливо видны обратные пики, принадлежащие атомам Ba и Si.

3. Установлено из расчетов по краю собственного поглощения, исследуемого образца, что значение ширины запрещенной зоны сформированной пленки $BaSi_2$, находится в интервале 1,1-1,3 эВ, что хорошо коррелирует с литературными данными.

На основании большого качественного сходства зависимостей коэффициентов поглощения образца и чистого $BaSi_2$, а также значительная близость полученных значений энергии запрещенной зоны образца с электронной структурой $BaSi_2$, взятой из литературных источников, дают основание полагать, что была образована орторомбическая форма дисилицида бария.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Green, M.A. Solar cell efficiency tables (version 51) / M.A. Green, Y. Hishikawa, E.D. Dunlop, D.H. Levi, J. Hohl-Ebinger, W.Y. Ho-Baillie // *Prog Photovolt Res Appl.* – 2017. – №26 – P. 3-12. Режим доступа: <https://dx.doi.org/10.1002/pip.2978>. – 15.05.2018
2. Migas, D. B. Isostructural BaSi₂, BaGe₂ and SrGe₂: electronic and optical properties / D. B. Migas, V. L. Shaposhnikov, V. E. Borisenko, // *Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics*. – 2007. – P. 1–8. Режим доступа: <https://dx.doi.org/10.1002/pssb.200642556>. – 21.05.2018
3. Morita, K. Optical and electrical properties of semiconducting BaSi₂ thin films on Si substrates grown by molecular beam epitaxy / K. Morita, Y. Inomata, T. Suemasu // *Institute of Applied Physics*. – 2005. – P. 363–366. Режим доступа: <https://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2005.07.344>. – 25.01.2018
4. Ajmal Khan, M. Precipitation control and activation enhancement in boron-doped p+-BaSi₂ films grown by molecular beam epitaxy / M. Ajmal Khan, K. Nakamura, W. Du, K. Toko, N. Usami, T. Suemasu // *Appl. Phys. Lett.* – 2014. – №104 – P. 252104-1- 252104-4. Режим доступа: <https://dx.doi.org/10.1063/1.4885553>. – 21.04.2018
5. Tsukahara, D. p-BaSi₂/n-Si heterojunction solar cells with conversion efficiency reaching 9.0 % / D. Tsukahara, S. Yachi, H. Takeuchi, R. Takabe, W. Du, M. Baba, Y. Li, K. Toko, N. Usami, T. Suemasu // *Appl. Phys. Lett.* – 2016. – №108 – P. 152101-1- 152101-5. Режим доступа: <https://dx.doi.org/10.1063/1.4945725>. – 21.04.2018
6. Fomin, D. V. Formation, structure and optical properties of nanocrystalline BaSi₂ films on Si(111) substrate / D. V. Fomin, V. L. Dubov, K. N. Galkin, D. L. Goroshko, A. M. Maslov, N. G. Galkin, R. I. Batalov, V. A. Shustov // *Solid State Phenomena*. - 2016.- № 245. - P. 42-48. Режим доступа: <https://dx.doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.245.42>. – 11.12.2017
7. Fomin, D. V. Formation and properties of crystalline BaSi₂ thin films ob-

tained by solid phase epitaxy on Si(111) / D. V. Fomin, V. L. Dubov, K. N. Galkin, N. G. Galkin, R. I. Batalov, V. A. Shustov // JJAP Conf. Proc. – 2017. – №5 – P. 011203-1- 011203-5. Режим доступа: <https://dx.doi.org/10.7567/JJAPCP.5.011203>. – 11.12.2017

8. Фелдман, Д. Основы анализа поверхности и тонких пленок: Пер. с англ. / Д. Фелдман, Л. Майер – М.: Мир, 1989. – 344 с.

9. Соболев, В. В. Расчеты оптических функций полупроводников по соотношениям Крамерса-Кронига. / В. В. Соболев, С. А. Алексеева, В. И. Донецких. - Кишинев: Штиинца, 1976. - 123 с.

10. Lucarini, V. Kramers-Kronig Relations in Optical Materials Research. / V. Lucarini, J. J. Saarinen, K. E. Peiponen, E. M. Vartiainen. - Springer, 2005. - 162 p. Режим доступа: <https://dx.doi.org/10.1007/b138913>. – 10.03.2018

11. Наджафов, Б. А. Определение оптических константов в тонких пленках a-Si:H и a-NK-C:H / Б. А. Наджафов // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. - 2016.- № 12. - С. 1613-1617.

12. Шалимова, К. В. Физика полупроводников: учеб. пособие. / К. В. Шалимова. - М.: Энергоатомиздат, 1985. - 392 с.

13. Войцеховский, А. В. Оптика полупроводников: учеб. пособие. / А. В. Войцеховский, А. С. Петров, Г. И. Потахова. - Томск: Том. ун-та, 1967. - 222 с.

14. Хайруллина, А. Я. Оптические константы наноструктурированных слоев из меди, никеля, палладия и некоторых оксидов в ультрафиолетовой и видимой областях спектра / А. Я. Хайруллина [и др.]. // Оптика и спектроскопия. - 2010. - Т. 108, Вып. 5. - С. 778-785.

15. Оура, К. Введение в физику поверхности / К. Оура [и др.]. – М. : Наука, 2005. – 150 с.

16. Wolstenholme, J. Auger Electron Spectroscopy./ J. Wolstenholme. – New York: Momentum Press, 2015. – 224 p.

17. Вудраф, Т. Современные методы исследования поверхности: Пер. с англ. / Т. Вудраф, Д. Делчар – М. : Мир, 1989. – 564 с.

18. Фомин, Д.В. Экспериментальные методы физики твердого тела: учебное пособие / Д.В. Фомин. – М.; Берлин: Директ–Медиа, 2014. – 186 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=259074>. – 26.01.2018.

19. Feng Juan, Z. First-principles calculations on the electronic structure and optical properties of BaSi₂ / Z. Feng Juan, X. Quan, C. Qian, Y. ChuangHua // Science in China Series G: Physics, Mechanics & Astronomy – 2009. – №52 – P. 580-586. Режим доступа: <https://dx.doi.org/10.1007/s11433-009-0086-1>. – 21.05.2018.

20. Панков, Ж. Оптические процессы в полупроводниках / Ж. Панков. – М.: Мир, 1973. - 458 с.

21. Migas, D.B. Electronic properties of thin BaSi₂ films with different orientations / D.B. Migas, V.O. Bogorodz, A.V. Krivosheeva, V.L. Shaposhnikov, A.B. Filonov, V.E. Borisenko // Jpn. J. Appl. Phys. – 2017. – №56 – P. 05DA03-1 - 05DA03-7. Режим доступа: <http://iopscience.iop.org/1347-4065/56/5S1/05DA03>. – 20.05.2018.

22. Дубов, В. Л. BaSi₂ — перспективный материал для фотоэлектрических преобразователей (обзор) / В. Л. Дубов, Д. В. Фомин // Успехи прикладной физики. - 2016.- № 6. - С. 599-605.

23. Nakamura, T. Investigation of the energy band structure of orthorhombic BaSi₂ by optical and electrical measurements and theoretical calculations / T. Nakamura, T. Suemasu, K. Takakura, F. Hasegawa, A. Wakahara, M. Imai // Applied physics letters. – 2002. – P. 1032–1034. Режим доступа: <https://dx.doi.org/10.1063/1.1498865>. – 20.05.2018.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Справочные данные

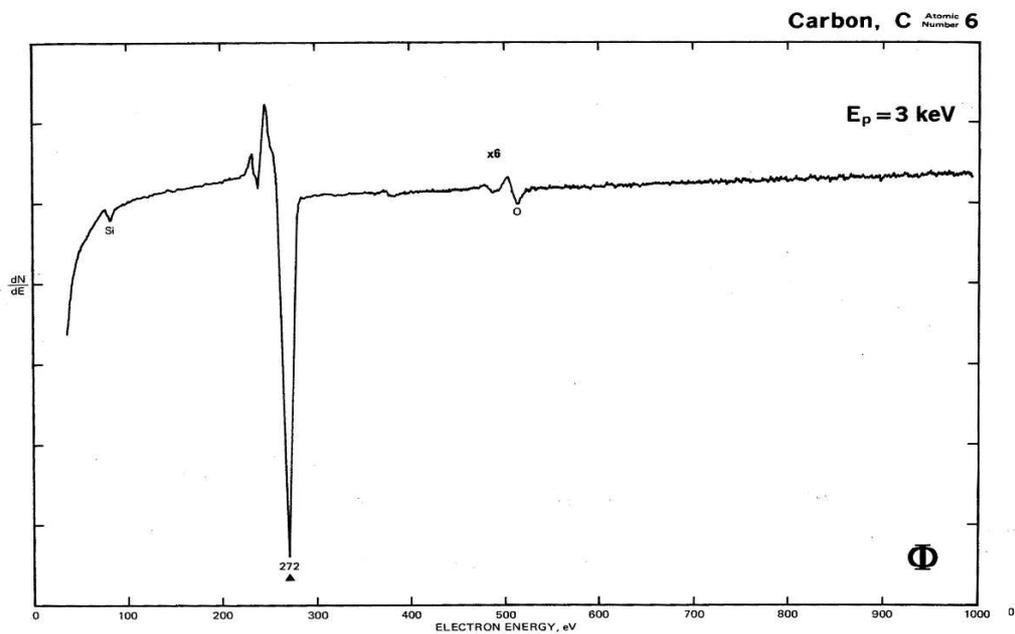


Рисунок А1 – Оже-спектр углерода С

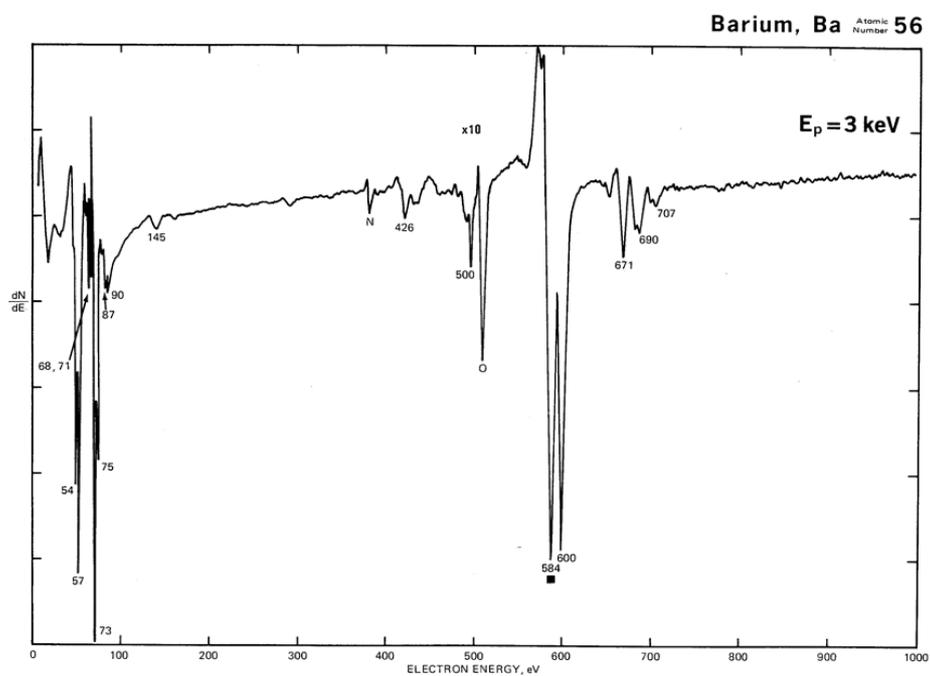


Рисунок А2 – Оже-спектр кремния Ва

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ А

Справочные данные

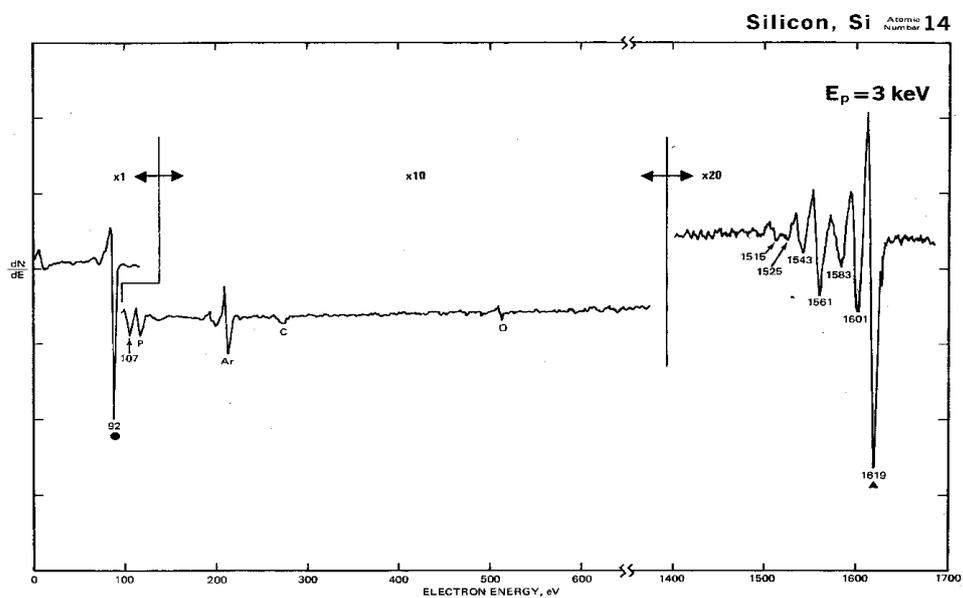


Рисунок А3 – Оже-спектр чистого Si

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Листинг программы

Файл *nka.m*:

%% Программа расчета оптических постоянных в прозрачной области спектра

rpath = 'C:\RT.xlsx'; % путь к файлу с данными

ndata = xlsread(rpath); % считывание значений из файла

i = 1:1200; % выборка необходимых значений

xx = 100E-9; % толщина пленки

xs = 0.35E-3; % толщина подложки

EE = ndata(:,1); % значения энергий

E = ndata(:,1)*1.6E-19; % значение энергий в джоулях

R = ndata(:,2); % значения отражения системы

T = ndata(:,3); % значения пропускания системы

Rs = ndata(:,5); % значения отражения подложки

Ts = ndata(:,6); % значения пропускания подложки

la = E.\3E8.*6.63E-34; % значения длин волн

zz = RTs(Rs(i),Ts(i),xs,la(i)); % расчет значений оптических постоянных подложки (см. файл RTs.m)

ns = zz(:,1); % значения показателя преломления подложки

as = zz(:,2); % значения коэффициента поглощения подложки

ks = zz(:,3); % значения коэффициента экстинкции подложки

%% Настройки оптимизатора

x0 = [1,1]; % начальное приближение

options=optimset('Display','none'); % отключение отображения в командной строке

options.TolFun = 1.000000e-0100; % точность значения функции

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

Листинг программы

```
options.TolX = 1.000000e-0100; %точность аргумента функции
options.MaxFunEvals = 3000; %макс. кол-во обращений к функции
options.MaxIter = 1000; %макс. кол-во итераций
options.Algorithm = 'levenberg-marquardt'; %выбор рабочего алгоритма
options.LevenbergMarquardt = 'on'; %метод Левенберга-Макуарда
options.LargeScale = 'off';

%% Вычисление значений оптических постоянных пленки
a = zeros(length(i),1); %создание множеств для результатов вычислений
n = zeros(length(i),1);
k = zeros(length(i),1);
for q = 1:length(i);
j = i(q);
y = fsolve(@f1,x0,options,[R(j),T(j),la(j), ...
    xs,xx,as(q),ns(q),ks(q),Rs(j),Ts(j))]; % вызов оптимизатора
n(q) = y(1); %значения показателя преломления пленки
a(q) = y(2); %значения коэффициента поглощения пленки
k(q) = (1/4)*la(j)*y(2)/pi; %значения коэффициента экстинкции пленки
end;

%% Вывод графиков
figure(1); %создание формы(окна) для графика
plot(EE(i),R(i),EE(i),Rs(i),EE(i),T(i),EE(i),Ts(i)); %построение графика
grid on; %включение сетки
xlabel 'E, эВ', ylabel '%'; %названия осей
legend 'R(E)' 'R_s(E)' 'T(E)' 'T_s(E)'; %легенда
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

Листинг программы

```
figure(2);
plot(EE(i),n,EE(i),ns);
grid on;
xlabel 'E, эВ';
legend 'n(E)' 'n_s(E)';

figure(3);
plot(EE(i),a,EE(i),as);
grid on;
xlabel 'E, эВ';
legend 'a(E)' 'a_s(E)';

figure(4);
plot(EE(i),k,EE(i),ks);
grid on;
xlabel 'E, эВ';
legend 'k(E)' 'k_s(E)';

%% Сохранение значений в файл
wpath = 'C:\nka.xlsx'; % файл для записи данных
xlswrite(wpath, EE(i), 'Лист1', 'A1'); % столбец энергий
xlswrite(wpath, n, 'Лист1', 'B1'); % столбец показателя преломления пленки
xlswrite(wpath, k, 'Лист1', 'C1'); % столбец коэффициента поглощения
пленки
xlswrite(wpath, a, 'Лист1', 'D1'); % столбец коэффициента экстинкции пленки
ки
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

Листинг программы

Файл *RTs.m*:

```
%% Функция вычисления оптических постоянных подложки
```

```
function z = RTs(Rs,Ts,xs,la)
```

```
x0 = [1,1];
```

```
options=optimset('Display','none');
```

```
options.TolFun = 1.000000e-010;
```

```
options.TolX = 1.000000e-010;
```

```
options.MaxFunEvals = 100;
```

```
options.MaxIter = 100;
```

```
options.Algorithm = 'levenberg-marquardt';
```

```
options.LevenbergMarquardt = 'on';
```

```
options.LargeScale = 'off';
```

```
ns = zeros(length(Rs),1);
```

```
as = zeros(length(Rs),1);
```

```
ks = zeros(length(Rs),1);
```

```
for k = 1:length(Rs);
```

```
y = fsolve(@f2,x0,options,[Rs(k),Ts(k),la(k),xs]);
```

```
ns(k) = y(1);
```

```
as(k) = y(2);
```

```
ks(k) = (1/4)*la(k)*as(k)/pi;
```

```
end;
```

```
z = [ns,as,ks];
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

Листинг программы

Файл *f1.m*:

%% Система уравнений для вычисления оптических постоянных пленки

function F = f1(xx,Y)

n1 = xx(1);

a = xx(2);

R = Y(1);

T = Y(2);

l = Y(3);

xs = Y(4);

x = Y(5);

as = Y(6);

ns = Y(7);

ks = Y(8);

Rs = Y(9);

Ts = Y(10);

k1 = (1/4)*l*a/pi;

R1 = ((n1-1)^2+k1^2)/((n1+1)^2+k1^2);

R2 = ((ns-1)^2+ks^2)/((ns+1)^2+ks^2);

R12= ((n1-ns)^2+(k1-ks)^2)/((n1+ns)^2+(k1+ks)^2);

F = [-T + (1-R1)*(1-R2)*(1-R12)*exp(-a*x-as*xs)/...

((1-R12*R2*exp(-2*as*xs))*(1-R1*R12*exp(-2*a*x))];

-R + R1+(1-R1)^2*R12*exp(-2*a*x)/(1-R12*R1*exp(-2*a*x))+ ...

T*R2*(1-R12)*(1-R1)*exp(-a*x-as*xs)/((1-R12*R1*exp(-2*a*x))* ...

(1-R12*R2*exp(-2*as*xs))*(1-R2)];

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ Б

Листинг программы

Файл *f2.m*:

%% Система уравнений для вычисления оптических постоянных подложки

```
function F = f2(xx, Y)
```

```
ns = xx(1);
```

```
as = xx(2);
```

```
Rs = Y(1);
```

```
Ts = Y(2);
```

```
l = Y(3);
```

```
xs = Y(4);
```

```
ks = (1/4)*1*as/pi;
```

```
F = [-Rs + ((ns-1)^2+ks^2)/((ns+1)^2+ks^2)+ ...
```

```
(1-((ns-1)^2+ks^2)/((ns+1)^2+ks^2))^2*((ns-1)^2+ks^2)* ...
```

```
exp(-2*as*xs)/(((ns+1)^2+ks^2)*(1-((ns-1)^2+ks^2)^2* ...
```

```
exp(-2*as*xs)/((ns+1)^2+ks^2)^2))
```

```
-Ts + (1-Rs)^2*exp(-as*xs)/(1-Rs^2*exp(-2*as*xs))];
```

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Листинг программы

Файл kkr.m:

%% Программа расчета оптических постоянных на основе разностного метода Крамерса-Кронига

%% ввод исходных данных

rpath = 'C:\test.xlsx'; % выбор таблицы с исходными данными

ndata = xlsread(rpath); % загрузка исходных данных из таблицы

w = ndata(:,3); % выбор массива энергии излучения

R = ndata(:,4); % выбор массива коэффициента отражения

%% ввод значений эталонных точек

kr = [30,50,100]; % порядковый номер соответствующий эталлоной точки в исходном массиве данных

nc = [3.4205;3.4209;3.4250]; % значения показателя преломления

kc = [0.3844e-3;2.7080e-004;3.6780e-007]; % значения показателя поглощения

tc = atan((2 .* kc ./ (nc .^ 2 + kc .^ 2 - 1))); % фаза отраженной волны

%% расчет оптических постоянных

l = 2:length(q)-1;

th = phs(w,R,l); % функция расчета интеграла Крамерса-Кронига

pr = mean(th(kr)-tc'./w(kr));

theta = (th-pr).*w(l);

k = abs(2 .* sqrt(R(l)) .* sin(theta) ./ ((1 - sqrt(R(l))) .^ 2 + 4 .* sqrt(R(l)) .* sin(theta ./ 2) .^ 2)); % вычисление показателя преломления

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ В

Листинг программы

```
n = (1 - R(l)) ./ (((1 - sqrt(R(l))) .^ 2) + 4 .* sqrt(R(l)) .* sin(theta ./ 2) .^ 2);
%вычисление показателя поглощения
e1 = n.^2.-k.^2; %вычисление действительной части диэл.проницаемости
e2 = 2*n.*k; %вычисление мнимой части диэл.проницаемости

%% расчет правил сумм для оптических функций
ne = 0;
ee = 0;
for i=2:length(e2)
    ne(i) = ne(i-1)+(w(i)-w(i-1))*(e2(i-1)+e2(i))/2*w(i); %вычисление эффек-
    тивного показателя преломления
    ee(i) = ee(i-1)+(w(i)-w(i-1))*(e2(i-1)+e2(i))/2/w(i); %вычисление эффектив-
    ной диэл.проницаемости
end;
ee = 1+2/pi.*ee;

%% вывод результатов
figure(1);
hold on;
plot(w(l),n,'blue','LineWidth', 2);
plot(w(l),k,'magenta','LineWidth', 2);
hold off;
grid on;
xlabel 'Е,ЭВ';
legend 'n' 'k';
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ В

Листинг программы

```
figure(2);  
plot(w(1),ne,'blue','LineWidth', 2);  
grid on;  
legend 'n_э_ф_ф';
```

```
figure(3);  
plot(w(1),ee,'blue','LineWidth', 2);  
grid on;  
legend '\epsilon_э_ф_ф';
```

Файл phs.m:

```
%% Функция расчета интеграла Крамерса-Кронига
```

```
function tt = phs(w,R,q)
```

```
a = 1; b = length(w);
```

```
l = length(q);
```

```
tt = zeros(1,l);
```

```
tt0 = zeros(1,l);
```

```
tt1 = zeros(1,l);
```

```
tt2 = zeros(1,l);
```

```
tt3 = zeros(1,l);
```

```
y = 0;
```

```
for j = q
```

```
y = y + 1;
```

Продолжение ПРИЛОЖЕНИЯ В

Листинг программы

```
Y = [w(j-1)^2 w(j-1) 1; w(j)^2 w(j) 1; w(j+1)^2 w(j+1) 1];
Z = [log(R(j-1));log(R(j));log(R(j+1))];
X = Y\Z;

C = X(1);
B = X(2);
A = X(3);

tt0 = log(R(a)) * log((w(j) + w(a)) / (w(j) - w(a))) / pi / w(j) / 0.2e1;
tt1 = 0;
for i = 1:length(w)-1
    if (i ~= j) && (i ~= j-1)
        tt1 = tt1+ 1/2/pi *((log(R(i)) - log(R(i + 1) / R(i)) * w(i) / (w(i + 1) - w(i))) *
log(abs((w(j) + w(i + 1)) * (w(j) - w(i)) / (w(j) - w(i + 1)) / (w(j) + w(i)))) / w(j) +
log(R(i + 1) / R(i)) * log(abs((w(j) ^ 2 - w(i) ^ 2) / (w(j) ^ 2 - w(i + 1) ^ 2))) / (w(i +
1) - w(i)));
        end;
    end;
    tt2 = ((w(j) * C / 0.2e1 + A / w(j) / 0.2e1) * log(abs((w(j) + w(j + 1)) * (w(j) -
w(j - 1)) / (w(j) - w(j + 1)) / (w(j) + w(j - 1)))) - B * log(abs((w(j) ^ 2 - w(j + 1) ^ 2) /
(w(j) ^ 2 - w(j - 1) ^ 2))) / 0.2e1 - C * (w(j + 1) - w(j - 1))) / pi;
    tt3 = -log(R(b)) * log((w(j) + w(b)) / (w(b) - w(j))) / w(j) / pi / 0.2e1;

tt(y) = tt0+tt1+tt2+tt3;
end;
```