

XURAMAN NÜSRƏT QIZI ƏHMƏDOVA

**DİELEKTRİK FUNKSİYASI VƏ ÇOXLAYLI STRUKTURLARIN
OPTİK MODELİ**

2220.01 – Yarımqeçiricilər fizikası

Fizika üzrə fəlsəfə doktoru elmi
dərəcəsi almaq üçün təqdim olunmuş dissertasiyanın

A V T O R E F E R A T I

Bakı - 2015

ХУРАМАН НУСРЕТ КЫЗЫ АХМЕДОВА

**ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ И ОПТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР**

2220.01 – Физика полупроводников

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
диссертации на соискание ученой степени
доктора философии по физике

Баку – 2015

**Работа выполнена в Институте Физики Национальной Академии
Наук Азербайджана**

Научный руководитель:

Член корреспондент НАНА

Н.Т.Мамедов

Официальные оппоненты:

Академик

Ф.М.Гашимзаде

Доктор физико-математических наук,

Профессор

В.М.Салманов

**Ведущая организация: Институт Радиационных проблем НАН
Азербайджана (лаборатория «Радиационной физики
полупроводников»)**

**Защита состоится « 07__» __10__ 2015 г. в __ на заседании
Диссертационного Совета D.01.011 при Институте Физики
Национальной Академии Наук Азербайджана по адресу: AZ1143,
Баку, пр. Г. Джавида 131. Факс: (+99412)5372292; e-mail
director@physics.ab.az**

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института Физики
Национальной Академии Наук Азербайджана.

Автореферат разослан «__»_____ 2015 г.

Ученый секретарь

Диссертационного Совета

Доктор физико-математических наук, проф. Д. Г. Араслы

Lay və altlığın qəfəs parametrlərinin uyğunsuzluq effektinin nəzərə alınması ilə ZnS (ZnSe)/GaAs və CuGaS₂/GaP kimi praktiki vacib sistemlər üçün optik düz məsələ həll olunmuşdur. Qəfəs parametrlərinin uyğunsuzluğu hesabına əmələ gələn yalnız təmiz elastooptik effekti müşahidə etmək üçün təbəqələrə olan tələblər təyin edilmişdir. Bu effekt nazik təbəqənin qalınlığından asılı olaraq ellipsometrik Δ - Ψ təsvirdə təqdim olunmuşdur.

ОБЩИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Актуальность темы. Одним из основных направлений развития современной технической базы человеческого общества является оптоэлектроника, реализующая в едином приборе возможности, связанные с одновременным использованием света и электронов. Как правило, рабочая часть оптоэлектронных приборов представляет собой некую плоскую структуру, состоящую из слоёв различных материалов. Взаимодействие света с каждым из этих слоёв и границами между ними будет полностью определять отражение и пропускание света структурой в целом. Понятно, что для оптического моделирования многослойных структур необходимы, помимо размеров, знание диэлектрической функции каждого слоя и учет интерференционных эффектов, связанных с границами между слоями. Для учета интерференционных эффектов, необходимо и достаточно, опять таки, знание диэлектрической функции каждого слоя. Иными словами, знание размеров слоёв и диэлектрической функции каждого слоя в отдельности позволяют полностью определить оптические параметры многослойной структуры. Расчет этих параметров для структуры, содержащей сколь-угодно большое количество слоёв проводится хорошо известным матричным методом Абея [1]

Нахождение оптических параметров всей многослойной структуры, исходя из известных значений диэлектрической функции и толщины каждого слоя принято называть решением прямой оптической задачи. На практике, однако, значительно более часто требуется решение обратной задачи; т.е. нахождение неизвестных диэлектрической функции и толщины какого-нибудь слоя многослойной структуры, исходя из известных оптических параметров и размеров всей структуры. В отличие от прямой, обратная является неизменно актуальной задачей огромной сложности, которая не имеет решения в явном виде и требует применения метода последовательных приближений. Пожалуй единственным исключением является случай полубесконечный слой/вакуум, но при этом речь не идет о многослойной структуре; т.е. структуре в которой больше чем один слой.

Диэлектрическая функция является фундаментальным оптическим параметром любого материала, характеризующим диэлектрический отклик его электронной подсистемы на внешнее

электромагнитное излучение. Производными параметрами от диэлектрической функции (ϵ), которая является тензором (ϵ_{ij}) и, в общем случае, величиной комплексной ($\epsilon = \epsilon_R + i\epsilon_I$), являются показатели преломления (n) и поглощения (k): $\epsilon_R = n^2 + k^2$ и $\epsilon_I = 2nk$. Обычно последние и используются в расчетах при моделировании многослойных структур.

Целью настоящей работы является решение обратной оптической задачи для различных многослойных тонкопленочных структур, представляющих большой интерес как с научной так и практической точек зрения. В отдельных случаях, в частности при моделировании оптических потерь в тонкопленочных солнечных элементах и исследовании влияния эффекта несоответствия параметров решеток подложки и нанесенного тонкого полупроводникового слоя на оптические параметры системы решалась прямая задача.

Объектами исследований являлись конкретные многослойные структуры с числом слоев от 2-х до 5-ти. В частности, таковыми являлись следующие системы, содержащие как оптически изотропные так и оптически анизотропные слои:

- пятна нефти с различных месторождений Каспийского моря на морской поверхности
- тонкие плёнки твердой фракции нефти - асфальтина, осажденные на поверхности известкового стекла (Инновационный сектор, Институт Физики, Азербайджан)
- тонкие плёнки сульфида кадмия, осажденные на поверхности известкового стекла в аргоновой атмосфере при отсутствие и наличии небольшого количества кислорода (до 5%) в газовой смеси (Инновационный сектор, Институт Физики, Азербайджан)
- тонкие плёнки CIGSe ($\text{CuIn}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Se}$) в структуре CIGSe/молибден/стекло (IRDEP, France)
- тонкие плёнки ITO ($90\%\text{In}_2\text{O}_3 + 10\%\text{SnO}_2$) и пары алмазоподобная пленка углерода /ITO на поверхности известкового стекла ((Инновационный сектор, Институт Физики, Азербайджан)
- солнечные элементы на основе теллурида кадмия (NREL, USA)
- сверхтонкие напряжённые слои сульфида цинка на подложке из арсенида галлия и медно-галлиевого сульфида на подложке из фосфида галлия

В качестве основной использовалась спектральная эллипсометрическая методология исследований, позволяющая, в

ƏHMƏDOVA XURAMAN NÜSRƏT QIZI

DİELEKTRİK FUNKSIYASI VƏ ÇOXLAYLI STRUKTURLARIN OPTİK MODELİ XÜLASƏ

Dissertasiya – spektroskopik ellipsometriya metodu əsasında çoxlaylı strukturlarının optik modellərinin qurulmasına və hər layın naməlum parametrlərinin tapılmasına həsr edilmişdir. İşdə, daxilində maye və bərk (kristallik və amorf) mühitlərinin nazik təbəqələri olan, bir sıra real çoxlaylı strukturlar üçün optik düz və tərs məsələlərinin həllinin ellipsometrik tədqiqatları aparılmışdır.

İşdə tədqiq olunan strukturlara aid materialların dielektrik funksiyaları üzrə yaradılan məlumat bankı tələb olunan funksionallığa (antiəksedən örtük, filtr, şəffaflandırıcı lay və s.) çatmaq məqsədilə istənilən praktiki vacib nazik təbəqəli sistemlərin optik parametrlərinin modelləşdirilməsinə imkan verir.

Dissertasiyada ellipsometrik metodologiya və spektroskopik ellipsometriyanın eksperimental metodlarının müasir vəziyyətinin təsvirinin ardından konkret praktiki cəhətdən vacib real çoxlaylı obyektlərin üzərində aparılan tədqiqatların nəticələri göstərilir.

Geniş spektral (ultrabənövşəyi, görünən və yaxın infraqırmızı) oblastda Xəzər dənizinin müxtəlif bölgələrindən götürülmüş həcmli və ultranazik neft təbəqələri və şüşə altlıq üzərinə çökdürülmüş neftin bərk fraksiyası olan asfaltinin dielektrik funksiyaları təyin edilmişdir. Alınmış nəticələr neftin ünvanlı və müəyyən dərəcədə genetik identifikasiyasında dielektrik funksiyasının ümumiləşdirilməsi optik iz kimi istifadəsinin imkanını göstərir.

Hal-hazırda geniş istifadə olunan CdS/CdTe və CIGSe əsaslı günəş elementlərinin tədqiq olunan fraqmentlərində CdS nazik təbəqələrinin dielektrik funksiyası və CIGSe layının qalınlığına görə dielektrik funksiyasının profili, həmçinin konkret çoxlaylı strukturların daxilindəki almazabənzər karbon təbəqələrinin dielektrik funksiyası təyin olunmuşdur. Oksigen əlavə edilməklə arqon mühitində alınmış CdS nazik təbəqələrində kvant ölçü effektinin müşahidə şərtləri müzakirə olunmuşdur.

Real günəş elementi olan şüşə/SnO₂/SnO₂/CdS/CdTe optik izotrop sistemi üçün optik düz məsələ həll olunmuş və sistemdə optik itkiləri minimuma gətirən layların optimal parametrləri təyin edilmişdir.

The direct optical task has been performed for the system glass/metallic $\text{SnO}_2/\text{SnO}_2/\text{CdS}/\text{CdTe}$ representing a real solar cell. The found output optical parameters have been solidly verified by ellipsometric measurements. The optimum values for layers thickness to provide the minimum optical losses have been found.

With taking the lattice mismatch between layer and substrate into account, the direct optical task has been performed for the practically important systems such as ZnS (ZnSe)/ GaAs and $\text{CuGaS}_2/\text{GaP}$. The requirements imposed on the real system to observe the lattice mismatch induced elasto-optic effect in its pure form in an optical experiment have been determined. The last effect is given in ellipsometric Δ - Ψ representation as a function of film thickness.

отличие от традиционных методов оптического поглощения и отражения, получать полную информацию о состоянии пробного луча света после отражения объектом исследований или прохождения через него. В настоящее время спектроскопическая эллипсометрия признана международным стандартом в качестве инструмента исследований многослойных тонкопленочных структур и определения диэлектрической функции. Регрессионный анализ эллипсометрических данных и определение диэлектрической функции проводились в рамках конкретных оптических моделей с использованием пробных модельных диэлектрических функций путём минимизации функции ошибок при определении соответствия между экспериментальными и рассчитанными эллипсометрическими параметрами. Расчеты эллипсометрических параметров Ψ (амплитудный параметр) и Δ (фазовый амплитудный параметр), параметризующих отношение (ρ) комплексных амплитудных коэффициентов отражения перпендикулярной (s) и параллельной (p) плоскости падения компонент электрического вектора световой волны через основное уравнение эллипсометрии $\rho = \tan(\Psi)e^{i\Delta}$, проводились с использованием специальных программных пакетов.

В ряде случаев для надежной интерпретации результатов привлекались данные, полученные для исследуемых объектов методами рентгеновской дифракции и флуоресценции, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, а также просвечивающей электронной, атомной силовой и конфокальной Рамановской микроскопий.

Научная новизна работы связана с определением диэлектрической функции целого ряда тонкопленочных материалов.

Практическая значимость связана с обеспечением возможности моделирования оптических параметров многослойных тонкопленочных систем, содержащих исследованные тонкопленочные материалы, и разработки оптических систем заданной функциональности (анти-отражающее покрытие, фильтр, просветляющий слой и т.д.). В качестве примера, в работе проводится моделирование оптических потерь и оптимизация структуры для тонкопленочных солнечных элементов на основе теллурида кадмия.

Результаты пионерских эллипсометрических исследований нефти, закладывают основу для развития метода "оптических отпечатков" для адресной идентификации нефтей.

**DIELECTRIC FUNCTION AND OPTICAL MODELS OF
MULTILAYER STRUCTURES**

SUMMARY

The dissertation is dedicated to building and construction of optical models for various multilayer structures and to finding unknown parameters of each layer with the aid of spectroscopic ellipsometry method. Ellipsometric studies necessary for performing the inverse and direct optical tasks have been carried out on a number of real multilayer structures that included thin layers of liquid and solid (crystalline and amorphous) substances.

The created data-base on dielectric function of the materials of which the studied structures consisted provides all opportunities for modeling the optical parameters and achieving the required functionality (antireflection coatings, filters, layers increasing transparency etc.) for various, practically important thin film structures.

Further to description of the ellipsometric methodology and of the state-of-the art on experimental methods of spectroscopic ellipsometry, the dissertation presents the results of the original studies carried -out on a number of particular, practically significant multilayer structures.

The dielectric function of the bulky and ultrathin layers of the crude oils from different oil fields in Azerbaijan and that of the oil's solid fraction - asphaltene that was deposited on glass substrate have been determined over the wide (ultraviolet, visible and near infrared) spectral range. The obtained results provide an opportunity to use dielectric function as a generalized optical fingerprint for addressed and, to a certain degree, genetic identification of the oils.

Along with that of the diamond-like carbon films in the particular multilayer structures, the dielectric function of CdS thin layers and its profile over the thickness of CIGSe layer have been determined by studying the fragments of CdS/CdTe and CIGSe thin film solar cells that are widely used today. The conditions for observation of the quantum size effect on CdS thin films obtained in the presence of oxygen in argon ambiance during deposition are discussed.

Основные положения выносимые на защиту:

1. Диэлектрическая функция сырой нефти описывается осцилляторной моделью с параметрами зависящими от ее месторождения.
2. Свехтонкие (>100 нм) и массивные слои сырой нефти описываются осцилляторной моделью с одной и той же энергией, но различными силами осциллятора и параметрами уширения.
3. Тонкие слои твёрдой фракции нефти - асфальтина и сырой нефти в ультрафиолетовой части спектра характеризуются оптическими переходами с одной и той же энергией.
4. Диэлектрическая функция тонких пленок CdS описывается модельной функцией Форроу-Блумберга.
5. Энергия оптических переходов на краю поглощения тонких пленок CdS не изменяется с увеличением концентрации кислорода в Ag/O газовой смеси вплоть до 3%.
6. Размытие краевой структуры в спектрах диэлектрической функции CdS с увеличением концентрации кислорода в Ag/O газовой смеси связано с аморфизацией поликристаллической структуры пленки, а сдвиг спектра в сторону больших энергий фотона при концентрациях кислорода выше 3% обусловлен не квантово-размерным эффектом, а образованием широкозонных соединений CdO и CdSO₄.

Аппробация работы. Материалы диссертационной работы докладывались и обсуждались на

- многочисленных семинарах Инновационного сектора Института Физики и обще-институтском семинаре Института Физики,
- республиканских конференциях: Мега-масштабные исследовательские проекты: материаловедение и информатика в высоких технологиях (Баку, 2012), Конференция молодых ученых в рамках 1-го фестиваля науки (Баку, 2011),
- 6-ой Международной конференции по спектроскопической эллипсометрии (Япония, Киото - 2013), 17-ой Международной конференции по тройным и многокомпонентным материалам (Азербайджан, Баку-2010), 18-ой Международной конференции по тройным и многокомпонентным материалам (Австрия, Зальцбург-2012), 19-й Международной конференции по тройным и многокомпонентным материалам (Япония, Ниигата-2014), 16-ой Международной конференции по тонким плёнкам (Хорватия, Дубровник -2014), Симпозиуме по материаловедению и инженерии - 2014 (Германия, Дармштад-2014)

19. Khalilova Kh, Gasimov N., Mammadov E., Mamedov N. Spectroscopic Ellipsometry study of optical constants of the crude oil-seawater system // EURAS Academic Journal, 2014, v. 2, №1, pp. 69-77
20. Nassar I. M., Aliyeva Y., Khalilova Kh., Mamiyev Z., Mammadov E., Alekperov, O. Bayramov A., Mamedov N. Semiconducting asphaltene thin films: preparation and characterization / 19th International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ICTMC 19), Niigata, Japan, 2014, p.93
21. Khalilova Kh., Shim Y., Asaba R., Wakita K., Mamedov N. Optical properties of as-prepared and annealed CdS:O thin films / 19th International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ICTMC 19), Niigata, Japan, 2014, p.111
22. Nakajima. M., Asaba R., Suzuki A., Shim Y., Wakita K., Khalilova Kh., Mamedov N., Bayramov A., Huseynov E. Structure and optical properties of CdS:O thin films by cathode sputtering / 19th International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ICTMC 19), Niigata, Japan, 2014, p.148
23. Khalilova Kh., Aliyeva Y., Gasimov N., Bayramov A., Mamedov N. Spectroscopic ellipsometry and Polarized Transmission intensity studies of asphaltene thin films / 16th International Conference on Thin Films (ICTF 16), Dubrovnik, Croatia, 2014, p.171
24. Khalilova Kh., Mammadov E., Bayramov A., Mamedov N. Crude oil - seawater system: ellipsometric view / 16th International Conference on Thin Films (ICTF 16), Dubrovnik, Croatia, 2014, p.171
25. Orudzhev V.A., Khalilova Kh. N., Hasanov I., Guseynov E. K. Deposition of nanostructured diamond-like films by electron beam evaporation of graphite / 16th International Conference on Thin Films (ICTF 16), Dubrovnik, Croatia, 2014, p.170
26. Khalilova Kh., Shim Y., Hasanov I., Asaba R., Wakita K., Mamedov N. Spectroscopic ellipsometry studies of as-prepared and annealed CdS:O thin films // Phys. Status Solidi, 2015, C 12, № 6, pp.592-595
27. Ibrahim M. N., Mamiyev Z., Khalilova Kh., Mammadov E., Aliyeva Y., Alekperov O., Bayramov A., Mamedov N. Semiconducting asphaltene thin films: preparation and characterization // Phys. Status Solidi, 2015, C 12, № 5-6, pp. 553-555
28. Nakajima M., Asaba R., Suzuki A., Shim Y., Wakita K., Khalilova Kh., Mamedov N., Bayramov A., Huseynov E. Structure and optical properties of CdS:O films by cathode sputtering // Phys. Status Solidi, 2015, C 12, № 6, pp. 781-784

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 28 работ, в том числе 11 в виде статей в местных и зарубежных журналах и 17 в виде тезисов республиканских и международных конференций.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, основных выводов и списка литературы. Работа изложена на 152 страницах машинописного текста, включая 16 таблиц, 60 рисунков и список литературы из 103 наименований.

Краткое содержание работы:

Во введении дана общая характеристика работы: обоснованы актуальность и цель работы, ее научная новизна и практическая ценность, сформулированы научные положения выносимые на защиту, представлены сведения о апробации работы и количестве публикаций по теме диссертации, структуре и объеме работы, дано краткое описание работы по главам.

Первая глава под названием <<Экспериментальные методы определения диэлектрической функции>> носит обзорный характер. В ней дается понятие диэлектрической функции и описывается ее связь с оптическими параметрами среды, анализируются экспериментальные методы определения диэлектрической функции и отмечается неизбежная необходимость применения эллипсометрической методологии, которая, в отличие от анализа Крамерса-Кронига спектров отражения и пропускания, является самосогласованной.

Начиная со второй половины прошлого века эллипсометрия прошла большой путь как в теоретическом [2] так и инструментальном отношении [3]. В обзорной главе особый акцент ставится на спектральной эллипсометрии [3], ставшей международным стандартом при исследовании оптических свойств кристаллических и аморфных материалов [4]. Отмечается, что в Азербайджане, и на пространстве бывшего СССР, в целом, спектральная эллипсометрия начала развиваться к концу 90-х годов прошлого века [5].

В соответствии со сформулированной целью работы, в этой главе также описываются современные способы обработки данных эллипсометрических исследований и решения задач для многослойных структур; отмечается, что решение обратной задачи эллипсометрии связано с построением оптической модели при одновременном выполнении пяти важных критериев. В частности, оптическая модель считается приемлемой, если

- является физически реалистичной,
- имеет маленькие значения функции ошибки,
- имеет малые значения 90% доверительных границ для варьируемых параметров,
- наблюдается хорошее соответствие между экспериментальными и рассчитанными значениями Ψ и Δ ,
- имеет приемлемо малые значения коэффициентов корреляции между вычисляемыми параметрами.

В настоящей работе при построении оптических моделей использовался алгоритм Левенберга-Макварта [6] и взвешенная тестовая функция для оценки добротности модели по каждому из определяемых параметров.

Вторая глава <<Спектро-эллипсометрический анализ и решение обратной оптической задачи для реальных многослойных систем жидкость/жидкость и жидкость/твердая фаза>> посвящена экспериментальным спектро-эллипсометрическим исследованиям сырой нефти и одной из ее твердых фракций асфальтина.

Несмотря на достаточо большое количество работ по оптическим свойствам нефти, в них отсутствует информация о её главном фундаментальном параметре - диэлектрической функции. Между тем, диэлектрическая функция, будучи определённой в широком интервале энергий фотона, является уникальным "оптическим отпечатком" присущим исключительно данному материалу.

В настоящее время для классификации нефтей используются биомаркеры. Количество известных на сегодня биомаркеров уже превышает 500 и генетическая идентификация образцов нефти на основе анализа количества тех или иных биомаркеров представляет собой сложную и весьма трудоёмкую задачу.

В начале главы приводится детальное описание методов фазомодулированной эллипсометрии и эллипсометрии с вращающимся компенсатором, примененных для исследования нефтей и остальных объектов исследования в данной работе, а также описываются специальная ячейка для исследования жидких фаз и особенности процедуры эллипсометрических измерений.

В основной части этой главы приводятся результаты спектро-эллипсометрических измерений проб морской воды с разных прибрежных участков Каспийского моря (Апшерон, Ленкорань, Набрань) и сырой нефти с месторождений Нефт Дашлары и Балаханы.

10. Khalilova Kh., Shim Y., Mammadov E., Hasanov I. Spectroscopic ellipsometry study of as-prepared and annealed CdS:O thin films / Böyük miqyaslı təqiqat layihələri: Yüksək texnologiyalar üçün materialşünaslıq və informatika, Bakı, 2012, s. P-14

11. Shim Y., Sakamoto J., Suzuki A., Khalilova Kh., Wakita K., Mamedov N., Bayramov A., Huseynov E., Hasanov I. Spectroscopic Ellipsometry Studies of CdS:O Layers for Solar Cells/ Böyük miqyaslı təqiqat layihələri: Yüksək texnologiyalar üçün materialşünaslıq və informatika, Bakı, 2012, s. P-27

12. Shim Y., Wakita K., Mamedov N., Bayramov A., Huseynov E., Khalilova Kh., Hasanov I. Optical parameters of CdS:O window layers for solar cells/ Böyük miqyaslı təqiqat layihələri:Yüksək texnologiyalar üçün materialşünaslıq və informatika, Bakı, 2012, s. P-28

13. Shim Y., Khalilova X., Mammadov E., Bayramov A., Wakita K., Mamedov N., Naghavi N., Jehl Z., Hildebrandt T., Lincot D., Guillemoles J.F. Ellipsometric characterization of glass/Mo/CIGSe thin film structures in the near infrared spectral region/ Böyük miqyaslı təqiqat layihələri:Yüksək texnologiyalar üçün materialşünaslıq və informatika, Bakı, 2012, s. P-29

14. Khalilova Kh., Mammadov E., Aliyeva Y., Gasimova N., Mamedov N. Ellipsometric investigation of optical constants of Caspian seawater and crude oils from different sources // Azerbaijan Journal of Physics. series En, 2013, v. XIX, №2, pp. 78-80

15. Kitano A., Shim Y., Wakita K., Khalilova K., Mamedov N., Bayramov A., Huseynov E., Hasanov I. Optical characterization of non-annealed CdS:O films for window layers in solar cells // Phys. Status Solidi, 2013, C 10, № 7–8, pp. 1107–1110

16. Khalilova Kh., Shim Y., Hasanov I. Spectroscopic ellipsometry studies of as-prepared and annealed CdS:O thin films/ VI International Conference on Spectroscopic Ellipsometry (ICSE- VI), Japan, Kyoto, 2013, p.11

17. Khalilova Kh., Shim Y., Wakita K., Mamedov N. Spectroscopic ellipsometry studies of as-prepared and annealed CdS:O thin films / Material Science Engineering-2014 (MSE 2014), Darmstadt, Germany, 2014, p.220

18. Khalilova Kh., Mammadov E., Mamedov N. Ellipsometric investigation of optical constants of Caspian seawater and crude oils from different sources / Material Science Engineering-2014 (MSE 2014), Darmstadt, Germany, 2014, p.222

Основные результаты диссертационной работы отражены в следующих публикациях:

1. Khalilova Kh., Huseynova D., Hamidov S., Jafarova V., Jahangirli Z., Orudzhev H., Mamedov N. Direct ellipsometry task for ZnS/GaAs, ZnSe/GaAs and CuGaS₂/GaP thin film/substrate systems //Azerbaijan Journal of Physics, 2010, v. XVI, № 2, pp. 89-94
2. Khalilova Kh., Huseynova D., Hamidov S., Jafarova V., Jahangirli Z., Orudzhev H., Mamedov N. Ellipsometric Study of Lattice-Mismatch Induced Elasto-optic Effect in ZnS/GaAs- and CuGaS₂/GaP-Thin Film/Substrate Systems //TRANSACTIONS, 2010, v.30, № 5, pp. 17-24
3. Shim Y., Sakamoto J., Suzuki A., Khalilova Kh., Wakita K., Mamedov N., Bayramov A., Huseynov E., Hasanov I. Spectroscopic Ellipsometry Studies of CdS:O Layers for Solar Cells / 17th International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ITMC-17), Baku, 2010, p. 71
4. Shim Y., Wakita K., Mamedov N., Bayramov A., Huseynov E., Khalilova K., Hasanov I. Optical parameters of CdS:O window layers for solar cells / European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes (EUROMAT-2011), Montpellier, France, 2011, p. E21-P-1-27
5. Shim Y., Sakamoto J., Suzuki A., Khalilova Kh., Wakita K., Mamedov N., Bayramov A., Huseynov E., Hasanov I. Spectroscopic Ellipsometry Studies of CdS:O Layers for Solar Cells // Japanese Journal of Applied Physics, 2011, v. 50, pp. 05FC14
6. Khalilova Kh. Spectroscopic Ellipsometry studies of CdS:O layers for solar cells// Gənc Alimlərin Əsərləri, 2011, №4
7. Shim Y., Khalilova X., Mammadov E., Bayramov A., Wakita K., Mamedov N., Naghavi N., Jehl Z., Hildebrandt T., Lincot D., Guillemoles J. Ellipsometric characterization of glass/Mo/CIGSe thin film structures in the near infrared spectral region / 18th International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ICTMC-18), Salzburg, Austria, 2012, p. 46
8. Kitano A., Shim Y., Wakita K., Khalilova X., Mammadov E., Mamedov N., Bayramov A., Huseynov E., Hasanov I. Optical characterization of non-annealed CdS:O films for window layers solar cells / 18th International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ICTMC-18), Salzburg, Austria, 2012, p. 139
9. Халилова Х. Вакуумный синтез бездефектных алмазоподобных пленок посредством электронно-лучевого испарения графита // Gənc Alimlərin Elmi Konfransının Materialları 2012, pp. 73-75

Показывается, что если диэлектрическая функция морской воды в Каспийском море практически не зависит от места взятия пробы, то разница в диэлектрической функции проб нефти с этих двух месторождений на два порядка превышает точность проведенных эллипсометрических исследований. Особенно большой оказывается разница в вещественной части диэлектрической функции, растущая при движении из ультрафиолетовой в ближнюю инфракрасную область спектра. Мнимая часть диэлектрической функции этих проб также заметно различается, но эта разница теперь уже уменьшается при движении в длиноволновую область спектра. Важным фактом, установленным при спектро-эллипсометрическом исследовании системы сверхтонкое нефтяное пятно/морская вода является одинаковый состав осцилляторов, формирующих диэлектрическую функцию сверхтонких и массивных образцов сырой нефти. Полученные результаты, позволяют использовать диэлектрическую функцию как универсальную кумулятивную (обобщенную) характеристику для адресной, а возможно, в определённой степени, и генетической идентификации нефтей.

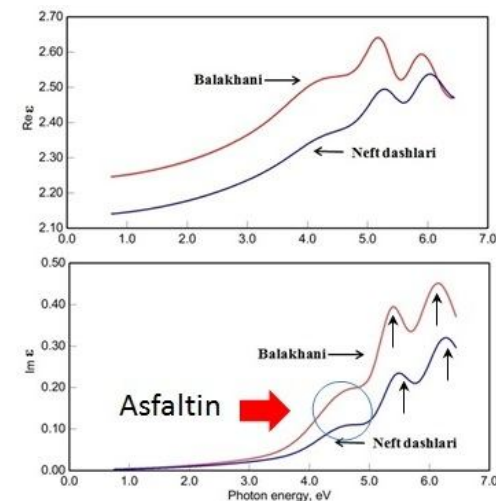


Рис.1. Действительная ($Re \epsilon$) и мнимая ($Im \epsilon$) части диэлектрической функции нефтей с месторождений Балаханы и Нефт Дашлары. Оптические переходы в гидрокарбонатах показаны вертикальными

стрелками, область переходов в твердой фракции нефти- асфальтине, взята в кружок.

Согласно проведенному рентгеновскому флуоресцентному анализу, основное различие исследованных образцов нефти состоит в содержании гидрокарбонатов. Оптические переходы именно в последних и определяют оптические свойства нефтей в ультрафиолетовой и фиолетовой областях спектра. Одинаковые по характеру структурные особенности диэлектрической функции нефти и асфальтина объясняются как раз этим фактом.

В третьей главе <<Спектро-эллипсометрический анализ и решение обратной оптической задачи для реальных многослойных твердотельных тонкопленочных структур>> представлены результаты спектро-эллипсометрических исследований тонкопленочных структур, которые объединяет тот факт, что все они являются фрагментами широко используемых сегодня солнечных элементов на основе CdTe и CIGSe. Особое место занимают результаты исследований тонких пленок CdS, выращенных на подложке из дешёвого известкового стекла методом магнетронного напыления. По сообщению [7] группы исследователей из NREL (National Renewable Energy Laboratory, USA), пока единственному на сегодняшний день, ширина запрещенной зоны пленок CdS, полученных этим методом в инертной атмосфере при наличии небольшого количества (до 5%) кислорода, увеличивается благодаря квантовому размерному эффекту, возникающему вследствие подавления кислородом роста размеров зерен в процессе напыления. При этом убедительных данных оптических измерений не приводится.

В солнечных элементах, CdS находится в непосредственном контакте с материалом (CdTe, CIGSe) активного слоя. Помимо функции одного из материалов образующегося p/n перехода, CdS играет также важную роль окна для излучения падающего на активный слой. Поэтому увеличение ширины запрещенной зоны CdS, а , следовательно и расширение его области пропускания, безусловно представляет большой интерес. Спектро-эллипсометрические исследования показывают, что присутствие кислорода в Ar/O газовой смеси во время напыления действительно приводит к определенному увеличению области пропускания тонких пленок CdS. Однако, причиной этого является не квантово-размерный эффект, а уширение краевых особенностей в диэлектрической функции и их сдвиг, при

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

- [1] Борн М., Вольф Э.: Основы оптики // издательство "Наука", Москва, 1973, 719 с.
- [2] Azzam R. M. A. and Bashara N. M. Ellipsometry and Polarized Light//North-Holland, Amsterdam, 1977
- [3] Fujiwara H. Spectroscopic Ellipsometry : Principles and Applications // John Wiley and sons, 2007, 369 p.
- [4] Adachi S. Optical Properties of Crystalline and Amorphous Semiconductors: Materials and Fundamental Principles. Boston/Dordrecht/London: Kluwer Academic Publishers, 1999, 261 p
- [5] Мамедов Н.Т., Мустафаев Ф. А., Алгазин Ю. Б., Федорин В. Н. Диэлектрическая проницаемость TlSe//Оптика и спектроскопия, 1990, т.68, 1200-1202 с.
- [6] W. H. Press W.H. , Flannery B. P. , Teukolsky S. A., and W. T. Vetterling W. T. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing // Cambridge University Press, Cambridge, 1988, Chap. 14.
- [7] Wu X., Yan Y., Dhere R. G., Zhang Y., Zhou J., Perkins C. and To B. Nanostructured CdS:O film: preparation, properties, and application //Physica Status Solidi, 2004, v. 1, pp.1062–1066
- [8] Jackson P., Hariskos D., Lotter E. et al. New world record efficiency for Cu(In,Ga)Se₂ thin-film solar cells beyond 20%//Progress in Photovoltaics: Research and Applications, 2011, vol. 19, no. 7, pp. 894–897
- [9] Fortunato E.; Ginley D, Hosono H. and Paine D. C. (March 2007). Transparent Conducting Oxides for Photovoltaics // MRS Bulletin, 2007, 32, pp. 242–247
- [10] http://en.wikipedia.org/wiki/Diamond-like_carbon
- [11] Ruda H.E. Wide gap II-VI Compounds for Optoelectronic Applications // Springer US, New York, 1992, 415 p.

ВЫВОДЫ

1. Построены оптические модели и решена обратная оптическая задача для реальных многослойных оптически изотропных тонкоплёночных систем — пятно нефти/морская вода,
— асфальтин/известковое стекло,
— сульфид кадмия/известковое стекло,
— CdSe / молибден/стекло.
— алмазоподобная пленка углерода /ITO /известковое стекло,
Определена диэлектрическая функция нефти, асфальтина, сульфида кадмия, алмазоподобной пленки углерода, ITO и CdSe .
2. Решена прямая оптическая задача для реальной оптически изотропной системы стекло// SnO_2 / SnO_2 / CdS / CdTe , представляющей солнечный элемент и определены оптимальные параметры слоёв, обеспечивающие минимум оптических потерь в системе.
3. Решена прямая оптическая задача для системы оптически анизотропный напряженный слой/изотропная подложка на примере полупроводниковых пар ZnS/GaAs и $\text{CuGaS}_2/\text{GaP}$, в которых, как показано, оптическая анизотропия возникает вследствие несоответствия параметров решетки пленки (ZnS , CuGaS_2) и подложки (GaAs , GaP). Определены требования к пленкам необходимые для наблюдения, в чистом виде, эласто-оптического эффекта, возникающего вследствие такого несоответствия. Построена зависимость эффекта от толщины пленки в эллипсометрическом Δ - Ψ представлении.

концентрациях кислорода больших чем 3%, в сторону больших энергий за счет образования широкозонных CdO и CdSO_4 .

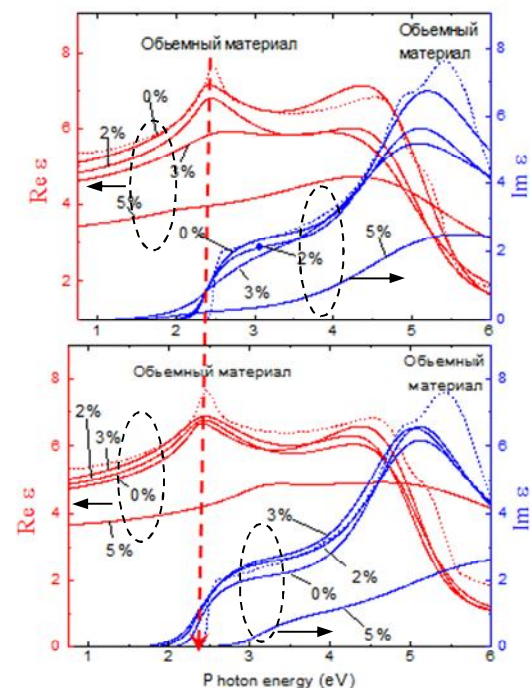


Рис.2. Действительная ($\text{Re } \epsilon$) и мнимая ($\text{Im } \epsilon$) части диэлектрической функции тонких плёнок CdS из разных (верхний и нижний рисунки) технологических партий, полученных в атмосфере кислорода разной концентрации. Вертикальной пунктирной стрелкой показано положение ширины запрещенной зоны объёмного CdS .

Солнечные элементы на основе медно-индиевого-галлиевого дисселенида (CdTe) имеют наиболее высокую эффективность преобразования (>20%) [8], среди коммерческих тонкопленочных солнечных элементов. Однако, в связи с нехваткой на земле индия и галлия, будущее производство этих солнечных элементов может быть обеспечено только при переходе на тонкие или сверхтонкие слои поглотителя, при сохранении высокой эффективности преобразования. Одним из технологических решений этой проблемы является

варьирование количества индия и галлия таким образом, чтобы постепенно уменьшать ширину запрещенной зоны поглотителя при удалении от границы CdS/CIGSe, но начинать вновь увеличивать эту зону при приближении к металлическому контакту.

Проведенные спектро-эллипсометрические исследования структуры CIGSe/молибден/стекло показали, что при постепенном травлении слоя CIGSe и понижении его толщины с 2 микрон до 500 нм его показатель преломления в ближней инфракрасной области постепенно растет, что свидетельствует об уменьшении ширины запрещенной зоны и, следовательно, приводит к уменьшению эффективной длины поглощения фотона. Последнее, как раз, и необходимо для реализации солнечных элементов с тонким или сверхтонким поглотителем.

В последнем параграфе третьей главы приводятся результаты спектро-эллипсометрических исследований структур ИТО/известковое стекло и пары алмазоподобная пленка углерода /ИТО на известковом стекле. Проводящие слои ИТО часто используются в тонкопленочных солнечных элементах [9], а алмазоподобные пленки углерода широко применяются в целом ряде промышленных отраслей [10]. Технологическая совместимость этих двух материалов открывает новые возможности их использования и полученные данные о диэлектрической функции этих материалов в тонкопленочном исполнении обеспечивают необходимую базу для моделирования оптических параметров приборов, использующих эти материалы.

Четвертая глава «Моделирование оптических потерь и эллипсометрическое представление эффекта несоответствия параметров решеток в многослойных тонкопленочных структурах» содержит результаты экспериментальных спектро-эллипсометрических исследований и моделирования, в рамках прямой оптической задачи, оптических потерь в солнечных элементах на основе теллурида кадмия, а также результаты решения прямой эллипсометрической задачи для полупроводниковых пар ZnS/GaAs и CuGaS₂/GaP, которые часто используются как элементы тех или иных практически важных тонкопленочных структур [11].

Проведенное моделирование оптических потерь в солнечных элементах на основе CdTe позволило не только точно воспроизвести экспериментально полученные спектры отражения в широкой области спектра при различных углах падения света на солнечный элемент, но и оптимизировать толщину слоев в структуре последнего.

Эласто-оптический эффект, неизбежно возникающий вследствие упругой деформации соприкасающихся (на атомном уровне) материалов с различными параметрами решетки, детально рассмотрен во второй части последней главы. Оценены толщины бездислокационных слоев, в которых только и возможно наблюдение, в чистом виде, эласто-оптического эффекта за счет несоответствия параметров решеток. Определены амплитудные коэффициенты отражения на внешней (вакуум/ZnS или CuGaS₂) и внутренней (ZnS/GaAs или CuGaS₂/InP) границах раздела. Детально рассмотрен вклад в оптические параметры, связанный с оптической анизотропией изначально изотропного слоя ZnS и с изменением параметров при сохранении характера оптической анизотропии изначально одноосного слоя CuGaS₂. Расчитанный эласто-оптический эффект и его зависимость от толщины слоёв приведены в эллипсометрическом представлении, удобном для использования при проведении эллипсометрического эксперимента.

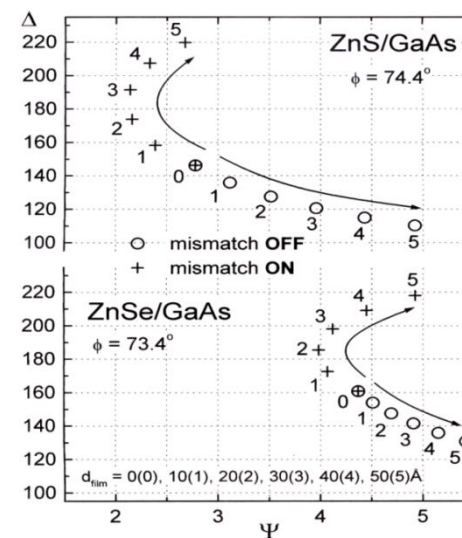


Рис.3. Δ - Ψ представление эффекта несоответствия кристаллических решеток пленки (ZnS, ZnSe) и подложки (GaAs) в зависимости от толщины пленки.