

块状和薄膜 CuInSe_2 的远红外反射光谱

姜嘉定

(山东大学光学系)

CuInSe_2 是一种可以制作光伏探测器、太阳能电池和发光二极管的化合物半导体。关于块状 CuInSe_2 的远红外反射光谱实验结果的 Kramers-Kronig 分析, Gan 等人和 Riede 等人得到了十分不同的结果。薄膜 CuInSe_2 的远红外反射光谱尚未见报道。

我们测量了块状和薄膜 CuInSe_2 在 $50\sim 400\text{ cm}^{-1}$ 光谱区的反射率。在实验数据的分析中, 我们采用了包括自由载流子效应和晶格共振的经典多振子模型, 它已被证实能满意地解释块状半导体的远红外反射光谱; 在分析薄膜数据时, 我们采用了两层陡变界面模型, 它已被证实在解释离子型衬底上半导体外延膜的远红外反射光谱时是成功的。

在分析中, 将远红外反射率数据和理论计算的光谱进行拟合。此种拟合使用了非线性多变量拟合程序, 它自动改变指定的各参数, 使理论计算的光谱和实验数据的方差最小。

关于块状样品, 远红外反射率实验数据和最好的拟合理论曲线十分一致。得到的 E 振动模式 ω_T 数值为 213, 208, 178 和 65 cm^{-1} , 这就支持了 Riede 等的结果。

关于薄膜样品出现两种情况: 熔凝石英衬底上 CuInSe_2 外延膜的远红外反射率实验数据和最好的拟合理论曲线十分一致; CdS 衬底上 CuInSe_2 外延膜的拟合结果则表现方差较大。这个结果表明, 两层陡变界面模型对于后者已不完全适用, 因为 CdS 半导体衬底与外延薄膜的界面效应已不可忽略。更精确的计算要求采用非陡变界面模型, 或者采用多层陡变界面模型。这样, 将需要长得多的计算时间。