

УДК 621.383.4/5

Влияние непрямых переходов на оптические характеристики гетероэпитаксиальных слоев соединений A_3B_5

А. В. Никонов, Н. И. Яковлева

Проведена оценка влияния непрямых Г-Л и Г-Х переходов в зоне Бриллюэна на оптические и электрофизические характеристики гетероэпитаксиальных слоев соединений A_3B_5 на примере тройных (InGaAs) и четверных (InGaAsP) соединений. Установлено, что с учетом непрямых переходов показатель преломления полупроводниковых соединений уменьшается на величину до 15 % в узком диапазоне длин волн 0,4—0,6 мкм.

PACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz, 07.57.Kp, 85.60.Dw, 42.25.Gy, 78.20.Ci

Ключевые слова: зона Бриллюэна, соединения A_3B_5 , индий-галлий-арсенид, непрямые переходы, диэлектрическая проницаемость, показатель преломления.

Введение

Для создания нового поколения лавинных фотодиодов ближнего ИК-диапазона в настоящее время активно используются гетероэпитаксиальные структуры на основе соединений группы A_3B_5 [1, 2]. Частным случаем является применение гетероэпитаксиальных структур на основе четверных соединений InGaAsP, выращенных на подложках фосфида индия. Благодаря прямой структуре энергетических зон данного материала обеспечиваются высокий коэффициент поглощения и высокое структурное совершенство с низкой плотностью дефектов.

Для определения характеристик лавинных фотодиодов актуальной задачей является контроль параметров исходных гетероэпитаксиальных структур (количество слоев, состав, толщина). Для подтверждения точности измерений необходима разработка комплекса теоретических расчётных методик для определения оптических параметров как отдельных эпитаксиальных слоев, так и много-

слойных гетероэпитаксиальных структур. В большинстве существующих методик [3, 4] не учитываются особенности кристаллической структуры исследуемых материалов.

Целью данной работы является исследование влияния непрямых переходов в зоне Бриллюэна на оптические параметры (коэффициент экстинкции, коэффициент поглощения, показатель преломления) эпитаксиальных слоев двойных, тройных и четверных соединений группы A_3B_5 .

Модель непрямых переходов в зоне Бриллюэна соединений A_3B_5

Изображённая на рис. 1 зонная диаграмма характерна для материалов со структурой цинковой обманки, к которым относятся соединения группы A_3B_5 . Значения энергий E_0 , E_1 , E_2 определяются особенностями кристаллической структуры материалов, в частности, постоянной решетки. В валентной зоне происходит отщепление одной подзоны из-за спин-орбитального взаимодействия, при этом две образовавшиеся подзоны можно аппроксимировать параболическими зависимостями с различной кривизной. В зоне «тяжелых» дырок вторая производная энергии по волновому вектору принимает меньшие значения, чем в зоне «легких» дырок. В большинстве реализованных моделей учитываются прямые Г-переходы при нулевом волновом векторе, но при повышении энергии излучения появляется вероятность как прямых переходов через L- и X-точки, так и непрямых Г-Л- и Г-Х-переходов. Оценка влияния L- и X-переходов на значения диэлектрической проницаемости и

Никонов Антон Викторович, ведущий инженер НИЦ¹, зам. зав. кафедрой².

Яковлева Наталья Ивановна, зам. начальника НИЦ¹.

¹ АО «НПО «Орион».

Россия, 111538, Москва, ул. Косинская, 9.

Тел. (499) 374-81-30. E-mail: orion@orion-ir.ru

² Московский физико-технический институт

(государственный университет).

Россия, 141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.

Статья поступила в редакцию 8 июля 2016 г.

© Никонов А. В., Яковлева Н. И., 2016

оптических характеристик эпитаксиальных слоев соединений A_3B_5 со структурой цинковой обманки проведена в работах [5, 6], однако непрямые переходы ранее пренебрегались в силу их меньшего влияния на характеристики соединений.

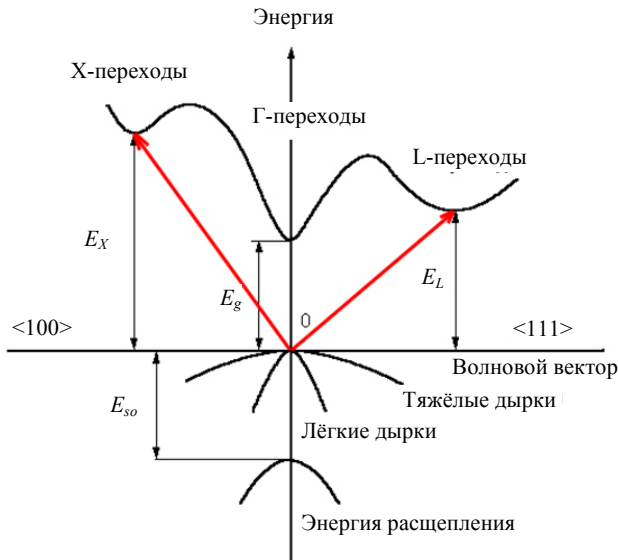


Рис. 1. Зонная диаграмма соединений A_3B_5 со структурой цинковой обманки.

Матричный элемент перехода из валентной зоны в зону проводимости является ключевой характеристикой при расчёте комплексной диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4h^2 e^2}{\pi m^2 \omega^2} \int dk |e \cdot M_{cv}|^2 \delta(E_c - E_v - \hbar\omega).$$

Связь между действительной и мнимой частями комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ описывается с помощью известных соотношений Крамерса-Кронига:

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega';$$

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega'.$$

Непрямые переходы в полупроводниковых соединениях со структурой цинковой обманки проявляют себя в меньшей степени по сравнению с прямыми переходами. Механизмы непрямых переходов из Γ -точек ($k = 0$) описываются с помощью модели малых возмущений второго порядка. Из такой модели выведена формула вклада непрямых переходов в мнимую часть комплексной диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{D}{(\hbar\omega)^2} (\hbar\omega - E_g^d + \hbar\omega_p)^2 H(1 - \varphi_g),$$

где D — силовой параметр непрямых переходов, описываемый с помощью зависимости от матричного момента перехода:

$$D = \sum_\beta \left| \sum_\alpha \frac{\langle \beta | H_{eL} | \alpha \rangle \langle \alpha | H_{eR} | 0 \rangle}{E_\alpha(k_1) - E_\beta(k_1) - \hbar\omega} \right|^2;$$

здесь φ_g — безразмерная величина энергии, связанная с энергией непрямого перехода E_g^d и энергией фотона $\hbar\omega_p$:

$$\varphi_g = \frac{E_g^d - \hbar\omega_p}{\hbar\omega}.$$

В представленной модели H_{eL} описывает переход электрон-излучение, H_{eR} — переход электрон-подложка; $|0\rangle$ — невозбужденное электронное состояние, $|\alpha\rangle$ — промежуточное состояние в зоне проводимости (при $k = k_1$ и энергии E_α), и $|\beta\rangle$ — конечное состояние в зоне проводимости ($k = k_2$).

По известным значениям силового параметра D для бинарных соединений [7] с использованием интерполяционной схемы рассчитаны значения D для полных диапазонов составов ($0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$) соединения $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$:

$$D(x, y) = 60,4 - 55,8x - 39,6y + 59,2xy.$$

Использование данной зависимости позволяет рассчитывать значение комплексной диэлектрической проницаемости для соединений $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ произвольного состава.

Исследование вклада непрямых переходов в значение диэлектрической проницаемости

Для расчёта оптических и электрофизических параметров тройных и четверных соединений группы A_3B_5 применим закон интерполяции Вегарда — аппроксимированное эмпирическое правило, согласно которому свойства кристаллической решетки сплава линейно зависят от концентрации отдельных элементов сплава [8]. В соответствии с законом Вегарда, установлена связь между параметрами четверного соединения $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ и соответствующими параметрами бинарных соединений InP , GaP , $GaAs$, $InAs$. Реализованы и построены модели зависимости энергий непрямых Γ -L- и Γ -X-переходов от состава соединения. Результаты моделирования показаны на рис. 2 и 3.

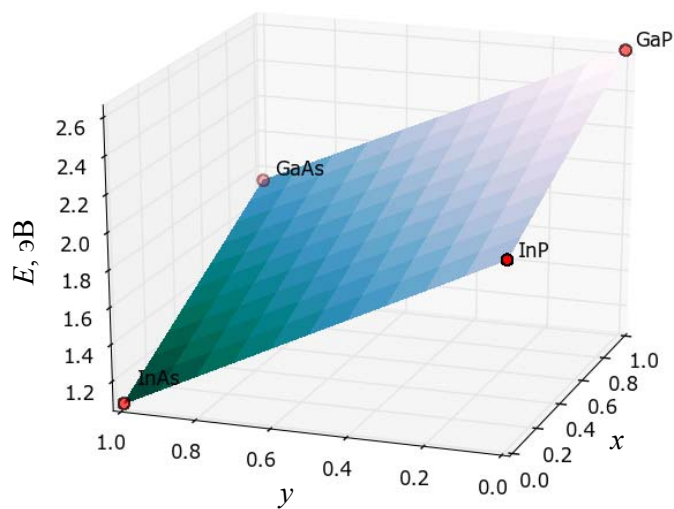


Рис. 2. Зависимость энергии Γ -L-переходов от состава соединения.

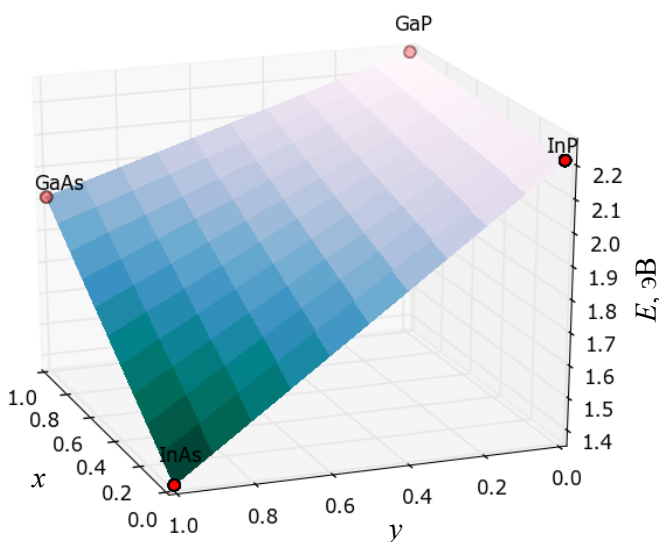


Рис. 3. Зависимость энергии Γ -X-переходов от состава соединения.

Реализованы зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости от энергии излучения для основных типов переходов в зоне Бриллюэна соединений со структурой

цинковой обманки. На рис. 4 показаны вклады не-прямых переходов в распределение составляющих диэлектрической проницаемости по энергиям излучения для тройного соединения $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$.

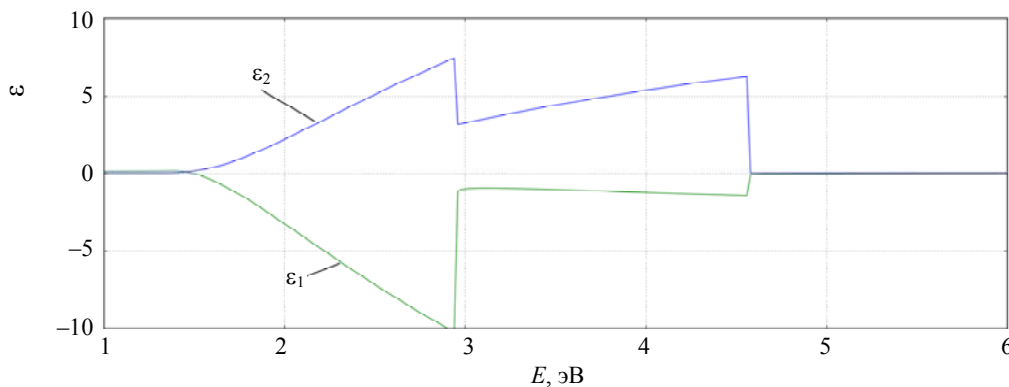


Рис. 4. Зависимость реальной ϵ_1 и мнимой частей ϵ_2 диэлектрической проницаемости соединения $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ от энергии кванта излучения E .

Показано, что изменение диэлектрической проницаемости начинается с энергии кванта излучения, соответствующей энергии непрямого перехода, и ограничивается энергиями прямых переходов.

Исследование вклада не прямых переходов в значения показателя преломления соединений A_3B_5

Распределение оптических характеристик (показателя преломления, коэффициента поглощения) материалов группы A_3B_5 в рамках модели прямых Γ -, L- и X-переходов исследовалось ранее [9, 10]. В рамках проведенного исследования модели оптических характеристик были усовершенствованы. На рис. 5 приведено сравнение распределения показателя преломления соединения $In_{0,53}Ga_{0,47}As$ с учетом и без учета не прямых переходов.

Из полученных зависимостей следует, что при уменьшении энергии кванта излучения показатели преломления n принимают стабильные значения порядка 3,2, что соответствует эксперимен-

тальным данным. На графиках присутствуют четко выраженные пики на диапазоне 0,3—1,5 эВ, соответствующие переходам E_0 и $E_0+\Delta_0$ исследуемых соединений. При дальнейшем повышении энергии показатель преломления увеличивается и достигает значений 4,5—5 при энергиях переходов E_1 и $E_1+\Delta_1$, соответствующих характеристикам исследуемых материалов. Пики, возникающие при энергиях порядка 4,5 эВ, соответствуют переходам с энергиями E_2 . По результатам исследований установлено, что не прямые переходы уменьшают показатель преломления эпитаксиальных на величину не более 15 % в узком диапазоне длин волн 0,4—0,6 мкм.

Отметим, что перспективой разработанной методики вычисления показателя преломления является её возможное применение в анализе спектральных характеристик как отдельных эпитаксиальных слоев, так и сложных многослойных гетероэпитаксиальных структур, включающих в себя слои различного состава, толщины и концентрации носителей и применяемых в технологии изготовления МФПУ ближнего ИК-диапазона 0,9—1,7 мкм.



Рис. 5. Сравнение зависимостей показателя преломления $InGaAs$ с учетом и без учета влияния не прямых Γ -L и Γ -X переходов.

Заключение

В ходе исследования разработана модель вкладов не прямых переходов Γ -L- и Γ -X-переходов в зоне Бриллюэна в значения комплексной диэлектрической проницаемости соединений A_3B_5 . Проведена оценка влияния не прямых переходов на оптические и электрофизические характеристики гетероэпитаксиальных слоев таких соединений. Установлено, что с учетом не прямых переходов показатель преломления полупроводниковых соединений уменьшается на величину до 15 % в узком диапазоне длин волн 0,4—0,6 мкм.

ЛИТЕРАТУРА

1. Филачев А. М., Таубкин И. И., Трищенко М. А. Современное состояние и магистральные направления развития твердотельной фотоэлектроники. — М.: Физматкнига, 2010.
2. Бурлаков И. Д., Дирочка А. И., Корнеева М. Д., Пономаренко В. П., Филачев А. М. // Успехи прикладной физики. 2014. Т. 2. № 5. С. 509.
3. Nahory R. E., Pollack M. A., Johnson W. D., Barns R. L. // Appl. Phys. Lett. 1978. Vol. 33. No. 7. P. 659.
4. Reid B., Maciejko R., Champagne A. // Can. J. Phys. 1993. Vol. 71. No. 410. P. 410.
5. Adachi S. // J. Appl. Phys. 1989. Vol. 66. No. 12. P. 6030.
6. Adachi S. Physical properties of III-V semiconductor compounds: InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP. — John Wiley & Sons, 1992.

7. Jensen B., Torabi A. // J. Appl. Phys. 1983. Vol. 54. No. 6. P. 3623.
 8. Denton A. R., Ashcroft N. W. // Phys. Rev. A. 1991. No. 43. P. 3161.

9. Никонов А. В., Куляхтина Н. М., Яковлева Н. И., Болтарь К. О. // Прикладная физика. 2015. № 5. С. 21.
 10. Скребнева П. С., Никонов А. В., Яковлева Н. И., Пономаренко В. П. // Успехи прикладной физики. 2015. Т. 3. № 5. С. 481.

Effects of the indirect transitions in A_3B_5 epitaxial layers

A. V. Nikonov^{1,2} and N. I. Iakovleva¹

¹ Orion R&P Association, Inc.
 9 Kosinskaya str., Moscow, 111538, Russia
 E-mail: orion@orion-ir.ru

² Moscow Institute of Physics and Technology
 9 Institutsky al., Dolgoprudny, Moscow region, 141700, Russia

Received July 8, 2016

Indirect transitions of Γ -L and Γ -X types in Brillouin zone of zinc-blende semiconductors were researched. Ternary (InGaAs) and quaternary (InGaAsP) alloys were the aim of interest. It was shown that indirect transitions make changes up to 15 % in refractive index in the narrow 0.4—0.6 μm spectral range.

PACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz, 07.57.Kp, 85.60.Dw, 42.25.Gy, 78.20.Ci

Keywords: Brillouin zone, A_3B_5 compounds, InGaAs, indirect transitions, dielectric function, refractive index.

REFERENCES

1. A. M. Filachev, I. I. Taubkin, and M. A. Trishenkov, *The Current Status and Main-Line Trackage for Development of Photoelectronics* (Fizmatkniga, Moscow, 2010) [in Russian].
2. I. D. Burlakov, A. I. Dirochka, M. D. Korneeva, V. P. Ponomarenko, A. M. Filachev, *Uspekhi Prikladnoi Fiziki* **2**, 509 (2014).
3. R. E. Nahory, M. A. Pollack, W. D. Johnson, et al., *Appl. Phys. Lett.* **33**, 659. (1978).
4. B. Reid, R. Maciejko, and A. Champagne, *Can. J. Phys.* **71**, 410 (1993).
5. S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **66**, 6030 (1989).
6. S. Adachi, *Physical properties of III-V semiconductor compounds: InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP* (John Wiley & Sons, 1992).
7. B. Jensen and A. Torabi, *J. Appl. Phys.* **6**, 3623 (1983).
8. A. R. Denton and N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. A.* **43**, 3161 (1991).
9. A. V. Nikonov, N. M. Kulyahtina, N. I. Iakovleva, K. O. Boltar, *Prikladnaya Fizika*, No. 5, 21 (2015).
10. P. S. Skrebneva, A. V. Nikonov, et al., *Uspekhi Prikladnoi Fiziki* **5**, 481 (2015).