Зависимость края поглощения пленок GeO_x $(0.21 \leq x \leq 1.95)$ от их состава

© В.В. Лямина[1], И.А. Азаров[1,2], Т.В. Перевалов[2], П.В. Швец[3], В.А. Володин[1,2]

[1] Новосибирский государственный университет,
630090 Новосибирск, Россия
[2] Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова
Сибирского отделения Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия
[3] Научно-образовательный центр „Функциональные наноматериалы“,
Балтийский федеральный университет им. И. Канта,
236041 Калининград, Россия

E-mail: volodin@isp.nsc.ru

Поступила в Редакцию 24 июня 2026 г.
В окончательной редакции 5 июля 2026 г.
Принята к публикации 21 июля 2026 г.

Методом импульсного лазерного осаждения были получены пленки GeO_x $(0.21 \leq x \leq 1.95)$ на подложках из плавленного кварца. Их состав варьировался с изменением давления кислорода при осаждении и определялся из данных резерфордовского обратного рассеяния. Методом спектроскопии комбинационного рассеяния света получено, что пленки состава $(0.21 \leq x \leq 1.48)$ содержат кластеры аморфного германия. Спектральные значения реальной и мнимой частей показателей преломления и толщины пленок были получены из анализа данных эллипсометрии и спектроскопии пропускания и отражения. Из этих данных была определена зависимость края фундаментального оптического поглощения от стехиометрического параметра x. Экспериментальные данные по краю поглощения были сравнены с данными, полученными из квантово-химических расчетов, рассчитанные значения края поглощения превышают измеренные.

Ключевые слова: нестехиометрический оксид германия, спектроскопия пропускания и отражения, коэффициент поглощения, модель Тауца, край фундаментального поглощения, комбинационное рассеяние света.

DOI: 10.61011/FTP.2026.04.63694.10274

1. Введение

Тонкие оксидные пленки играют важную роль в оптике и электронике. Среди таких тонкопленочных материалов свое применение нашли оксиды германия. Они представляют интерес в качестве диэлектрического материала для создания структур металл-диэлектрик-полупроводник (МДП), которые используются, например, в полевых транзисторах на основе германия. Поскольку диоксид германия не стабилен, для создания МДП-транзисторов используются пленки нестехиометрического оксида германия GeO_x $(x < 2)$ либо GeO_xN_y (оксинитрид германия) [1]. Другая область применения пленок GeO_x — это мемристоры [2]. Кроме того, оксиды германия в виде тонких пленок используют в качестве покрытия, уменьшающего отражение света в солнечных элементах, тем самым повышая их эффективность [3], и в качестве анодных слоев в аккумуляторных батареях [4]. Так как оксиды германия обладают хорошим сочетанием механических и оптических свойств, они также используются для изготовления линз, волноводов, фотодетекторов и окон, прозрачных в инфракрасном диапазоне [5,6], а также в составе многослойных интерференционных фильтров [7,8]. В пленках GeO_x обнаружен эффект фотостимулированного изменения показателя преломления, который позволяет получать голографические решетки на их основе [9]. Однако в литературе крайне мало данных о зависимости края фундаментального поглощения пленок GeO_x от их состава, известны только работа исследователей из США [10] и работа нашей группы [11]. Поэтому представленная работа посвящена заполнению этого пробела в знаниях.

2. Методика

Пленки аморфного оксида германия были получены на подложках из плавленного (аморфного) кварца методом импульсного лазерного осаждения (ИЛО). Была использована оригинальная ростовая установка на базе устройства SMART NanoTool PLD (https://svta.com/systems/pulsed-laser-deposition-systems/). В качестве источника излучения использовалась четвертая гармоника (266 нм) импульсного лазера Nd:YAG, длительность импульса — 7 нс, частота — 10 Гц, плотность излучения — ≈ 0.5 Дж/см^2. В качестве мишени для осаждения пленок методом ИЛО использовался чистый кристалл германия, подложка не нагревалась. Расстояние от мишени до подложки составляло 5.8 см. Состав пленок изменялся путем варьирования давления кислорода, которое изменялось от 1 до 10 мТорр. Фоновый вакуум составлял 10^{-7} Торр, следовательно, пленки росли в атмосфере чистого кислорода. Время осаждения

изменялось от 60 мин (максимальное давление кислорода, скорость осаждения выше) до 90 мин (минимальное давление кислорода, скорость осаждения меньше).

Толщина пленок контролировалась с использованием метода рентгеновской рефлектометрии (*X*-ray reflection — XRR). Кривые XRR были получены с использованием системы Bruker AXS D8 DISCOVER с излучением CuK_α (0.15406 нм) в стандартной геометрии $\theta-2\theta$. Детектор Bruker LynxEye A17-B60 был настроен на точечный режим во время измерений. Шаг составлял $2\theta = 0.002°$, а время сбора данных — 3 с на точку. Данные рефлектометрии анализировались с помощью программного обеспечения с открытым исходным кодом GenX 3 [12].

Элементный состав исследуемых образцов определялся методом спектрометрии резерфордовского обратного рассеяния (РОР) на ускорителе Ван де Граафа AN2500 (High Voltage Engineering Europa B.V.). Образец облучался пучком $^4He^+$ с энергией 1.5 МэВ. Угол между пучком и нормалью к поверхности образца составлял 5°, угол выхода — 21°, угол рассеяния — 160°. Ток пучка и полный накопленный заряд составляли ~ 5 нА и 30 мкКл соответственно. Анализ экспериментальных спектров проводился с использованием программного обеспечения SIMNRA [13].

Для анализа наличия в пленках кластеров аморфного германия использовалась спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС). Спектры КРС регистрировались с помощью спектрометра T64000 Horiba Jobin Yvon в геометрии обратного рассеяния при комнатной температуре. В качестве источника возбуждающего излучения применялся волоконный лазер с длиной волны 514.5 нм (НПО „Инверсия-Файбер“). Спектральное разрешение составляло 2 $см^{-1}$. Диаметр лазерного пятна был ~ 30 мкм, а мощность пучка составляла 1 мВт, что не приводило к заметному локальному нагреву области под пятном лазера и диспропорционированию пленок GeO_x в соответствии с реакцией $(GeO_x \rightarrow (1-x/2)Ge + x/2\,GeO_2)$.

Для регистрации спектров пропускания (T) и отражения (R) в работе использовался спектрофотометр Shimadzu UV-3600. Спектральное разрешение составляло 2 нм, исследуемый диапазон — 190–2500 нм. Для регистрации спектров зеркального отражения использовалась специальная приставка с углом падения света к нормали 5°. В качестве эталонного зеркала использовалась полированная Si-пластина. Измеренный спектр был нормирован на спектр отражения эталона. Для расчета реальной и мнимой частей показателя преломления пленок GeO_x и их толщины использовалась аппроксимация измеренных спектров пропускания и отражения рассчитанными спектрами, для этого применялась специальная программа для ЭВМ (пример применения программы показан в работе [11]).

Для нахождения толщин пленок GeO_x, реальной и мнимой частей показателя преломления также использовался спектральный эллипсометр АСЭБ-5 (Новосибирск). Спектральный диапазон составлял 250–900 нм, разрешение — 2 нм.

Расчеты атомной и электронной структуры GeO_x были проведены в рамках теории функционала плотности (ТФП) в модели периодических ячеек, приближении псевдопотенциалов с плосковолновым базисом в программном пакете Quantum ESPRESSO. Получены модельные суперъячейки GeO_x с $x = 0.75$, 1.0, 1.25, 1.5, 1.75, 2.0, структура которых удовлетворяет модели неупорядоченной случайной сетки (Random bonding, RB). Расчеты структурной релаксации осуществлялись с обменно-корреляционным функционалом PBEsol, а спектры полной плотности электронных состояний — с гибридным функционалом Heyd–Scuseria–Ernzerhof, который дает близкие к эксперименту значения E_g для GeO_2 (6.0 эВ).

3. Результаты

Спектры РОР для пленок состава $GeO_{0.59}$ и $GeO_{1.72}$ приведены на рис. 1. Ионы с энергией 1100–1250 кэВ отражаются от атомов германия, поэтому чем выше сигнал в этом диапазоне относительно сигнала подложки (600–800 кэВ), тем меньше кислорода в пленке. Параметр стехиометрии пленок определялся путем подгонки модельного спектра к экспериментальному. В модель была заложена простая структура SiO_2/GeO_x, и варьировались толщина пленки и количество кислорода в ней. Толщина также дополнительно определялась методом XRR по периоду осцилляций Киссинга (см. вставку на рис. 1).

Спектры КРС пленок GeO_x и подложки из плавленого кварца представлены далее на рис. 2. В спектре подложки присутствуют особенности, связанные с колебаниями Si–O-связей. Это широкая полоса от ~ 200 до 550 $см^{-1}$ и небольшой пик с положением 495 $см^{-1}$.

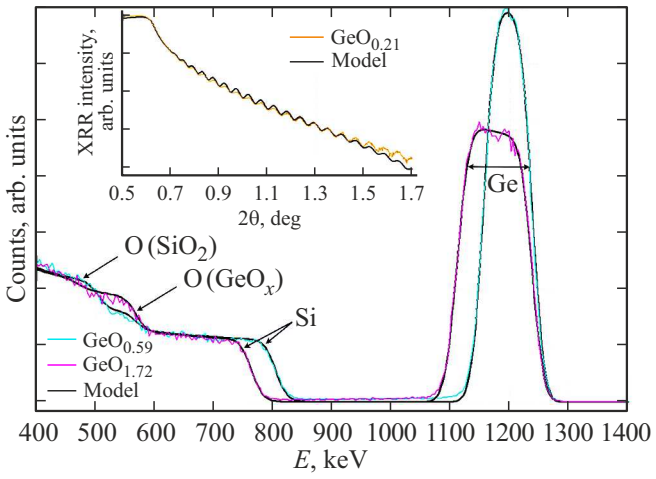


Рис. 1. Спектры РОР для пленок GeO_x разной стехиометрии. На вставке приведена кривая XRR для пленки $GeO_{0.21}$. Черные кривые — результаты моделирования.

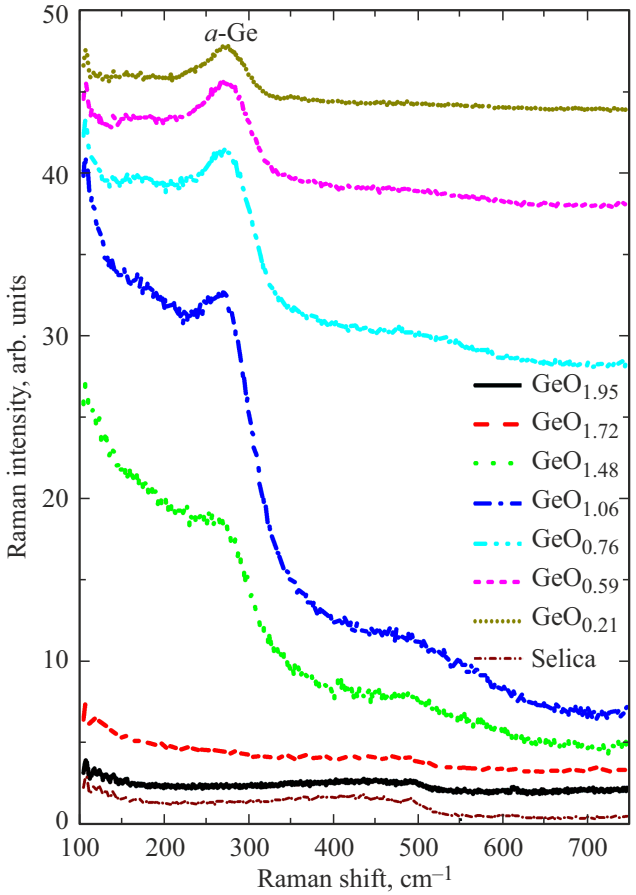


Рис. 2. Спектры КРС исследуемых образцов.

Последний пик в литературе связывают с дефектами (пяти- и семичленными кольцами). Видно, что особенности, связанные с КРС от подложки плавленого кварца, проявляются в спектре только самой прозрачной пленки — $GeO_{1.95}$. В остальных пленках сигнал от подложки практически не дает никакого вклада, поэтому его не вычитали из спектра образцов.

Сигнал КРС от аморфных веществ определяется их эффективной плотностью колебательных состояний. Для аморфного германия это широкая полоса с максимумом 275–280 $см^{-1}$ [14]. Из рисунка видно, что эти полосы в спектрах КРС начинают проявляться для состава $GeO_{1.48}$ и меньших x. Это соответствует наличию именно аморфных кластеров германия в пленках такого состава.

Наличие кластеров германия определяется не только параметром состава x, но и моделью нестехиометрического аморфного оксида. Есть два „крайних“ случая — модель случайных фаз (random mixture model — RMM) и модель неупорядоченной случайной сетки (random bonding model — RBM). В первой пленка GeO_x представляет собой смесь аморфного германия и диоксида германия, а молярная доля аморфного германия составляет $1 - x/2$. Во второй присутствуют тетраэдры $Ge{-}Ge_\nu O_{(4-\nu)}$ всех пяти возможных типов ($\nu = 0, 1, 2, 3$ и 4). Вероятность присутствия каждого типа тетраэдров зависит от параметра состава x [15]. Формально кластеры германия присутствуют и в этом случае, даже при x, стремящемся к 2. Однако, что считать кластером германия? Это два атома германия, три, четыре или больше? В нашем случае кластер германия — это объект, электронный спектр которого близок к электронному спектру аморфного германия (с учетом квантово-размерного эффекта). Именно такой кластер проявляется в спектрах КРС при возбуждении зеленым светом, так как в этом случае условия КРС близки к резонансным. Наличие таких „больших“ (по нашим оценкам, сотня атомов и более) кластеров может зависеть от способа получения пленок, но в основном зависит от температуры подложки. При температуре 400°C и более проистекает реакция диспропорционирования, и структура пленки тяготеет к модели случайных фаз. То, что мы не видим наличия „больших“ кластеров германия при параметре состава $x = 1.72$ и более, говорит о том, что наши пленки по структуре более близки к модели неупорядоченной случайной сетки.

Можно обратить внимание на то, что в спектрах КРС некоторых пленок наблюдается фон, нарастающий в области низких частот. Возможно, это связано с бозонным пиком, который часто присутствует в спектрах КРС стеклообразных материалов [16]. Видно, что фон, нарастающий в области низких частот, наблюдается для пленок GeO_x „среднего“ состава ($0.76 \le x \le 1.48$). Причина этого пока не ясна и может являться предметом дальнейших исследований.

Для всех пленок были получены спектральные зависимости эллипсометрических углов Δ и Ψ. Затем обратная задача эллипсометрии решалась следующим образом. В однопленочной модели рассчитывались значения углов Δ и Ψ, и путем варьирования параметров они подгонялись к полученным из эксперимента

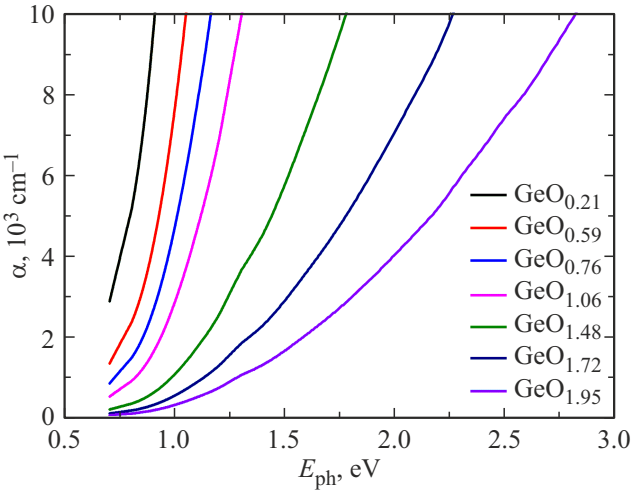


Рис. 3. Зависимость коэффициента поглощения от энергии фотона, полученная из данных спектральной эллипсометрии.

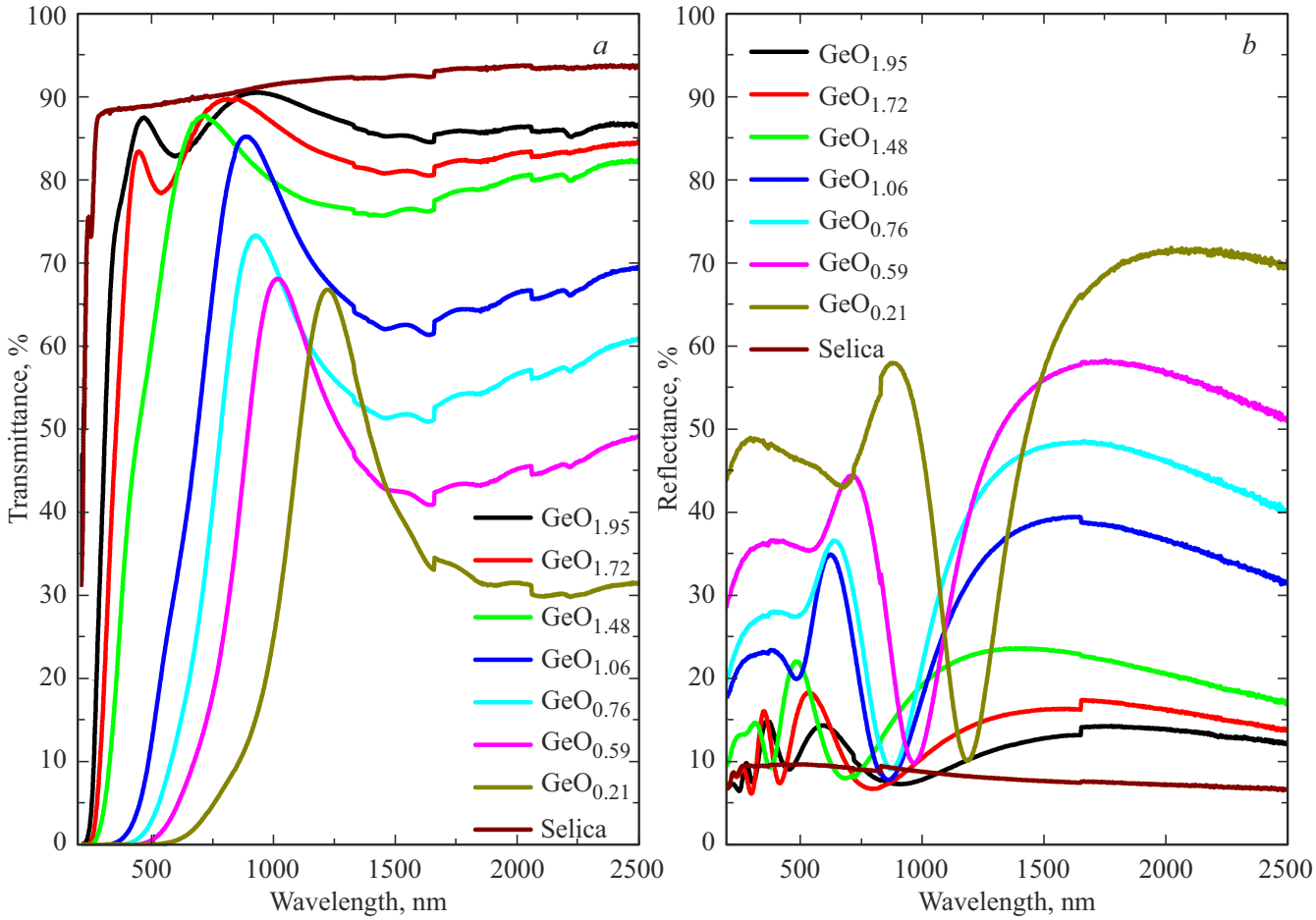


Рис. 4. Спектры пропускания (a) и отражения (b) исследуемых образцов.

значениям. Параметрами являлись толщина пленки, а для получения реальной и мнимой частей показателя преломления и толщин пленок GeO_x использовалась формула Лоренц–Лоренца. Затем определялся коэффициент поглощения α в зависимости от длины волны. Результаты представлены на рис. 3. Видно, что чем меньше кислорода в пленке, тем она менее прозрачная.

Спектры пропускания (T) и отражения (R) всех пленок, а также подложки были измерены и представлены на рис. 4, *a* и *b*. Видно, что кварцевая подложка прозрачна до длины волны ≈ 250 нм. В спектрах пропускания и отражения видны максимумы и минимумы, связанные с интерференцией света в пленках. Наличие интерференции не позволяет точно определить край поглощения в пленках GeO_x. Для количественного анализа показателей поглощения и преломления спектры пропускания и отражения пленок GeO_x были аппроксимированы с помощью вышеупомянутой программы. Пример аппроксимации экспериментальных спектров пропускания и отражения пленок GeO_x можно найти в работах [11,17]. Итак, из моделирования были определены показатели преломления (n) и поглощения (k), а также толщины пленок таким образом, чтобы добиться совпадения экспериментальных и расчетных спектров пропускания и отражения. В результате были получены спектральные зависимости оптических констант n и k. Из зависимости показателя поглощения (k) от длины волны (λ) можно рассчитать спектральную зависимость коэффициента поглощения (α — в $см^{-1}$) по формуле $\alpha = \frac{4\pi \cdot 10^7}{\lambda(\text{nm})} \cdot k$.

По данным моделирования спектров T и R, зная значения мнимой части показателя преломления, был построен график зависимости коэффициента поглощения от энергии фотона (рис. 5). График выглядит „ломаным“, так как подгонка программой велась по точкам, а значения между точками интерполировались линейной зависимостью.

Эти данные в дальнейшем были использованы для расчета края поглощения (оптической щели) по модели Тауца [18]. Метод заключается в следующем. Так как в аморфных материалах отсутствует трансляционная симметрия и не сохраняется квазиимпульс, оптические переходы возможны из занятого электроном энергетического состояния в незанятое энергетическое состояние, должен выполняться лишь закон сохранения энергии. Мнимая часть диэлектрической проницаемости

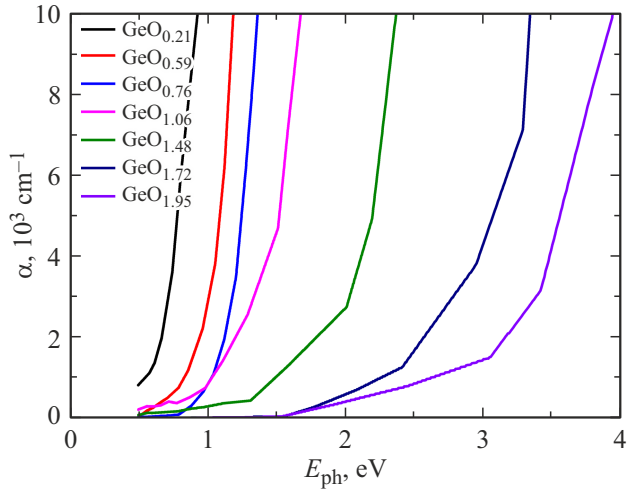


Рис. 5. Зависимость коэффициента поглощения GeO_x от энергии фотона по данным моделирования из спектров пропускания и отражения.

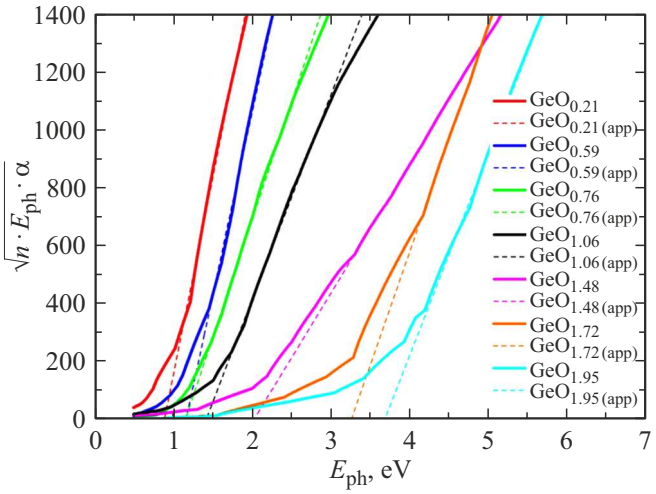


Рис. 6. Аппроксимация в координатах Тауца для всех пленок GeO_x.

в аморфном материале пропорциональна следующему выражению:

$$\epsilon_2(\omega) \propto \frac{1}{\omega^2} \int g_c(E) \cdot g_v(\hbar\omega - E) dE, \qquad (1)$$

где g_c и g_v — плотности состояний в зоне проводимости и валентной зоне соответственно. Для дальнейшего упрощения можно сделать предположение, что вблизи краев зон $g_c(E) \sim E^{1/2}$ и $g_v(E) \sim E^{1/2}$, как в кристаллических материалах. Это означает, что энергия отсчитывается от края соответствующей зоны, т. е. $g_c(E) \propto \sqrt{E - E_c}$ и $g_v(E) \propto \sqrt{E_v - E}$, где E_c и E_v — энергии зоны проводимости и валентной зоны. В этом случае свертка (1) принимает вид

$$\int_{E_g}^{\hbar\omega} \sqrt{E - E_g} \cdot \sqrt{\hbar\omega - E} dE, \qquad (2)$$

$E_g = E_c - E_v$ — ширина запрещенной зоны. После вычисления интеграла получаем:

$$\epsilon_2(\omega) \propto \frac{(\hbar\omega - e_g)^2}{\omega^2}.$$

Связь коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ и мнимой части диэлектрической проницаемости:

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{n(\omega)c} \epsilon_2(\omega), \qquad (3)$$

где n — показатель преломления (реальная часть). Подставив $\epsilon_2(\omega)$ в (3), получим

$$\alpha(\omega) \propto \frac{(\hbar\omega - E_g)^2}{n(\omega)c\omega}. \qquad (4)$$

Извлечем квадратный корень и умножим обе части на $\hbar\omega$:

$$\sqrt{\alpha(\omega) \cdot n(\omega) \cdot \hbar\omega} \propto (\hbar\omega - E_g). \qquad (5)$$

Итак, формула (5) описывает модель Тауца. Она удобна тем, что значение выражения в левой части формулы (5) „спрямляется“ в зависимости от энергии фотона.

На рис. 6 показаны результаты для коэффициентов поглощения всех исследуемых пленок, построенные в координатах Тауца. Видно, что край поглощения сдвигается в „синюю“ спектральную область при увеличении содержания кислорода. Также на рис. 6 видно наличие так называемых „хвостов“ Урбаха. Это всегда наблюдается в случае неупорядоченных твердых тел.

Также, в дополнение к данным XRR, толщины пленок были определены из анализа данных спектральной эллипсометрии и спектроскопии пропускания и отражения, результаты приведены в таблице.

Значения фундаментального края поглощения были получены различными способами: из модели Тауца, из данных спектральной эллипсометрии и спектроскопии пропускания и отражения. Также есть упрощенный

Толщины пленок, полученные с помощью различных методов

Образец	Толщины пленок, нм		
	XRR	Эллипсометрия	Моделирование T и R
$GeO_{1.95}$	248 ± 2	252 ± 15	260 ± 15
$GeO_{1.72}$	220 ± 2	215 ± 12	220 ± 12
$GeO_{1.48}$	172 ± 2	170 ± 9	172 ± 8
$GeO_{1.06}$	165 ± 1	169 ± 7	173 ± 7
$GeO_{0.76}$	142 ± 1	148 ± 5	147 ± 5
$GeO_{0.59}$	140 ± 1	147 ± 6	137 ± 4
$GeO_{0.21}$	136 ± 1	133 ± 3	133 ± 3

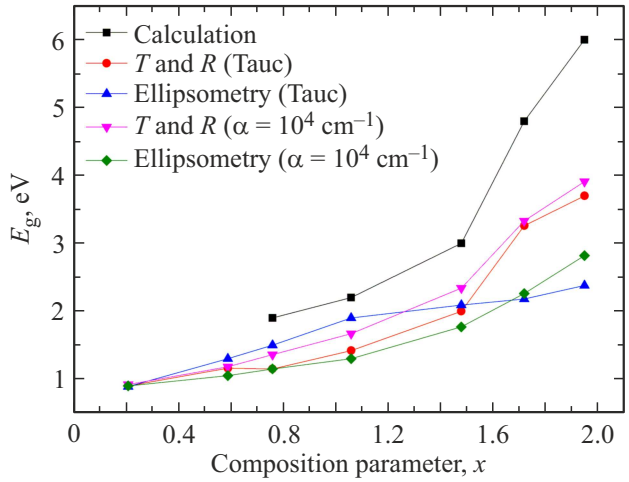


Рис. 7. Зависимость края поглощения от количества кислорода в GeO_x, данные получены четырьмя различными методами. Черная линия с квадратиками — рассчитанные данные.

способ определения края поглощения. Часто за край поглощения принимают значение энергии фотона, при котором коэффициент поглощения α равен 10^4 см$^{-1}$ [19]. Значения коэффициента поглощения α также были определены из данных спектральной эллипсометрии и спектроскопии пропускания и отражения. На рис. 7 показаны значения края поглощения, полученные с применением всех четырех способов.

В согласии с экспериментальными данными наблюдается монотонный рост рассчитанных из первых принципов значений E_g с увеличением параметра x (рис. 7). Расчетные данные систематически переоценивают значения E_g, что можно объяснить использованием в расчетах модели бесконечного бездефектного кристалла.

Видно, что экспериментальная зависимость края поглощения, полученного из данных спектроскопии пропускания и отражения упрощенным способом ($\alpha = 10^4$ см$^{-1}$, розовая кривая, треугольники с вершиной вниз на рис. 7), хорошо повторяет расчеты, только значения расчетов завышены. Наибольшая ошибка у образца с $x = 1.95$, поскольку у спектрометра Shimadzu UV-3600 в УФ-диапазоне падает чувствительность и растет шум. Итак, для быстрой оценки края поглощения можно пользоваться упрощенным способом. Однако для анализа „хвостов“ Урбаха важно использовать модель Тауца.

4. Заключение

Исследованы спектры пропускания и отражения пленок GeO_x ($0 < x < 2$) в диапазоне длин волн от 190 до 2500 нм. Определено наличие кластеров германия в пленках состава с $x \le 1.48$. Получены значения показателей преломления и поглощения (n и k) каждой пленки с помощью компьютерного моделирования спектров пропускания и отражения. Было проведено сравнение толщин пленок с помощью трех методов: XRR, эллипсометрии и моделирования спектров пропускания и отражения. Рассчитаны края оптического поглощения пленок различного состава в координатах Тауца. Получена зависимость оптической ширины запрещенной зоны от стехиометрического состава пленок GeO_x, созданных методом импульсного лазерного осаждения. Установлено, что повышение концентрации кислорода в составе пленки приводит к увеличению ее оптической прозрачности, что сопровождается смещением края полосы поглощения в сторону более коротких длин волн. Полученные данные в целом согласуются с теорией и могут найти применение в оптических приложениях.

Благодарности

Работа проводились в рамках выполнения государственного задания № FWGW-2025-0023. Авторы выражают благодарность Центру коллективного пользования научным оборудованием „Высокие технологии и аналитика наносистем“ при Новосибирском государственном университете за предоставленное оборудование для записи спектров комбинационного рассеяния света пленок GeO_x. Авторы из БФУ им. И. Канта благодарят Министерство науки и высшего образования за поддержку в рамках государственного задания, проект FZWM-2024–0011. Квантово-химическое моделирование осуществлялось на вычислительном кластере ИВЦ НГУ.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] P. Bhatt, K. Chaudhuri, S. Kothari, A. Nainani, S. Lodha. Appl. Phys. Lett., **103**, 172107 (2013). DOI: 10.1063/1.4826142
[2] A.V. Shaposhnikov, T.V. Perevalov, V.A. Gritsenko, C.H. Cheng, A. Chin. Appl. Phys. Lett., **100**, 243506 (2012). DOI: 10.1063/1.4729589
[3] V.G. Dyskin, M.U. Dzhanklych. Appl. Solar Energy, **57**, 252 (2021). DOI: 10.3103/S0003701X2103004X
[4] D. Lv, M.L. Gordin, R. Yi, T. Xu, J. Song, Y.-B. Jiang, D. Choi, D. Wang. Adv. Funct. Mater., **24** (8), 1059 (2013). DOI: 10.1002/adfm.201301882
[5] A. Choudhury, A. Dalal, S.M. Manohar Dhar Dwivedi, A. Ghosh, N. Halder, S. Das, A. Mondal. Mater. Res. Bull., **142**, 111397 (2021). DOI: 10.1016/j.materresbull.2021.111397
[6] A. Chiasera, C. Macchi, S. Mariazzi, S. Valligatla, L. Lunelli, C. Pederzolli, D.N. Rao, A. Somoza, R.S. Brusa, M. Ferrari. Opt. Mater. Express, **3** (9), 1561 (2013). DOI: 10.1364/OME.3.001561
[7] V.F. Zinchenko, V.P. Sobol, I.R. Magunov, O.V. Mozgova. Vopr. Khim. Khim. Tekhnol., **6**, 29 (2018). DOI: 10.32434/0321-4095-2018-121-6-29-33

[8] K.S. Eloyan, V.A. Volodin, M. Vergnat. Sci. Lett., **4**, 94 (2015).
[9] Ф.А. Назаренков, Н.А. Растрененко. Опт. и спектр., **46** (5), 1013 (1979).
[10] N.R. Murphy, J.T. Grant, L. Sun, J.G. Jones, R. Jakubiak, V. Shutthanandan, C.V. Ramana. Optical Mater., **36**, 1177 (2014).
[11] К.Н. Астанкова, Н.А. Кислухин, А.Д. Самусь, А.А. Мацынин, С.В. Комогорцев, И.А. Азаров, В.А. Володин. ФТТ, **68** (2), 269 (2026). DOI: 10.61011/FTT.2026.02.62716.8833
[12] A. Glavic, M. Björck. J. Appl. Crystallogr., **55**, 1063 (2022). DOI: 10.1107/S1600576722006653
[13] M. Mayer. AIP Conf. Proc., **475**, 541 (1999). DOI: 10.1063/1.59188
[14] M. Wihl, M. Cardona, J. Tauc. J. Non-Cryst. Sol., **8–10**, 172 (1972). DOI: 10.1016/0022-3093(72)90132-9
[15] К.Н. Астанкова, В.А. Володин, И.А. Азаров. ФТП, **54** (12), 1296 (2020). DOI: 10.21883/FTP.2020.12.50228.9508a
[16] J. Schroeder, W. Wu, J.L. Apkarian, M. Lee, L.-G. Hwa, C.T. Moynihan. J. Non-Cryst. Sol., **349**, 88 (2004). DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2004.08.265
[17] G. Hamoud, A. Samus, A. Matsynin, S. Komogortsev, V. Zhandun, I. Prosvirin, K. Astankova, I. Azarov, P. Geydt, I. Milekhin, V. Volodin. Thin Sol. Films, **836**, 140869 (2026). DOI: 10.1016/j.tsf.2026.140869
[18] J. Tauc. Mater. Res. Bull., **3**, 37 (1968). DOI: 10.1016/0025-5408(68)90023-8
[19] T.V. Perevalov, V.A. Volodin, G.N. Kamaev, G.K. Krivyakin, V.A. Gritsenko, I.P. Prosvirin. J. Non-Cryst. Sol., **529**, 119796 (2020). DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2019.119796

Редактор Г.А. Оганесян

Dependence of the optical gap GeO_x films ($0.21 \leq x \leq 1.95$) on their composition

V.V. Lyamina[1], *I.A. Azarov*[1,2], *T.V. Perevalov*[2], *P.V. Shbets*[3], *V.A. Volodin*[1,2]

[1] Novosibirsk State University, 630090 Novosibirsk, Russia
[2] Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 630090 Novosibirsk, Russia
[3] Scientific and Educational Center „Functional Nanomaterials“, Immanuel Kant Baltic Federal University, 236041 Kaliningrad, Russia

Abstract The GeO_x films ($0.21 \leq x \leq 1.95$) were grown on fused silica substrates using pulsed laser deposition. Their composition was varied by changing the oxygen pressure during deposition and was determined from Rutherford backscattering data. Raman spectroscopy showed that films with a composition ($0.21 \leq x \leq 1.48$) contain amorphous germanium clusters. Spectral dependances of the real and imaginary parts of the refractive indices and film thickness were obtained from ellipsometry and transmission-reflection spectroscopy data. From these data, the dependence of the optical gap on the stoichiometric parameter x was determined. Experimental optical gap data were compared with data obtained from quantum chemical calculations; the calculated optical gap values exceed the measured ones.