

06;07

Оптические свойства твердого раствора (Ge₂)_{1-x}(InP)_x

© Ш.К. Исмаилов, А.С. Саидов, К. Дуршимбетов, Б. Жоллыбеков

Ургенский государственный университет, Узбекистан
Физико-технический институт АН РУз, Ташкент, Узбекистан
Каракалпакский госуниверситет, Нукус, Узбекистан
Каракалпакский госпединститут, Нукус, Узбекистан
E-mail:smag@uzsci.net

Поступило в Редакцию 10 января 2006 г.

Исследованы оптические свойства твердых растворов (Ge₂)_{1-x}(InP)_x с использованием ab initio расчетов электронной структуры с помощью самосогласованного скалярно-релятивистского полнопотенциального метода линейных muffin-tin-орбиталей и теории функционала плотности в рамках локальной плотности заряда.

PACS: 78.20.-e, 81.05.Hd

Выращивание новых полупроводниковых материалов и исследование их свойств является актуальной задачей в области полупроводникового материаловедения. Ранее в [1] был получен монокристаллический и непрерывный твердый раствор (Ge₂)_{1-x}(InP)_x из класса (C₂^{IV})_{1-x}(A³B⁵)_x методом жидкофазной эпитаксии. Установлено, что состав твердого раствора, характеризуемый параметром „x“, меняется от 0 до 1 между Ge подложкой и InP. Отметим, что гетероэпитаксия фосфида индия на германий представляет большой интерес благодаря близости параметров решеток германия и фосфида индия, несмотря на большую разницу в ширине их запрещенных зон. Поскольку соединения (C₂^{IV})_{1-x}(A³B⁵)_x являются твердыми растворами замещения, их образование происходит тем легче, чем более схожи физические параметры взаимозамещающих компонентов. В литературе отсутствуют сведения об электронной структуре и оптических свойствах твердых растворов типа (C₂^{IV})_{1-x}(A³B⁵)_x, за исключением теоретической работы [2], в которой изучен твердый раствор (Ge₂)_{1-x}(AsGa)_x методом линейной комбинации атомных орбиталей.

В данной работе приведены результаты исследований оптических параметров для различных составов твердого раствора $(\text{Ge}_2)_{1-x}(\text{InP})_x$ с $x = 0, 0.5, 0.75$ и 1.0 с использованием расчета электронной структуры с помощью *ab initio* расчетов самосогласованным скалярно-релятивистским полнопотенциальным методом линейных muffin-tin-орбиталей [3] и теории функционала плотности [4] в рамках локальной плотности заряда [5]. В *ab initio* расчетах использована форма обменно-корреляционного потенциала в форме, предложенной в [6].

Как отмечено в [1], твердый раствор $(\text{Ge}_2)_{1-x}(\text{InP})_x$ кристаллизуется в решетку цинковой обманки (типа сфалерита), параметр решетки (a) которой зависит от состава x . Составы твердых растворов $(\text{Ge}_2)_{1-x}(\text{InP})_x$ $x = 0.0, x = 0.5, x = 0.75$ и $x = 1.0$, рассмотренных в данной работе, соответствуют твердым растворам Ge, $(\text{Ge}_2)_{0.5}(\text{InP})_{0.5}$, $(\text{Ge}_2)_{0.25}(\text{InP})_{0.75}$ и InP. Параметры решетки Ge и InP взяты из [7], а параметры решеток твердых растворов $(\text{Ge}_2)_{0.5}(\text{InP})_{0.5}$, $(\text{Ge}_2)_{0.25}(\text{InP})_{0.75}$ взяты из рентгеноструктурных измерений в [1], которые соответственно равны $a = 5.673 \text{ \AA}$ и $a = 5.743 \text{ \AA}$.

Анализ показал, что электронные свойства Ge и InP, найденные из расчетов данной работы, согласуются с *ab initio* расчетами других авторов (см., например, [8,9]). Затем, с использованием результатов расчета электронной структуры, найдена мнимая часть диэлектрической функции. Как известно из литературы (см., например, [8,9]), параметр $\varepsilon_2(\omega)$ тесно связан с основными свойствами дисперсии зоны и вероятностью межзонных оптических переходов. Зная $\varepsilon_2(\omega)$ и используя соотношение Крамерса–Кронига, можно найти остальные оптические параметры. В данной работе рассмотрены реальная часть диэлектрической функции $\varepsilon_1(\omega)$, коэффициент поглощения $\alpha(\omega)$ и отражения $R(\omega)$. Исследование проведено для интервала энергий от 0.0 до 12.0 eV (рис. 1). Полученные результаты для Ge и InP сопоставлены с экспериментальными [7,8] и теоретическими данными [8,9].

На рис. 1 и 2 представлены результаты расчета реальной и мнимой частей диэлектрической функции $\varepsilon_1(\omega)$ и $\varepsilon_2(\omega)$ (рис. 1), а также коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ и отражения $R(\omega)$ (рис. 2) для Ge, $(\text{Ge}_2)_{0.5}(\text{InP})_{0.5}$, $(\text{Ge}_2)_{0.25}(\text{InP})_{0.75}$ и InP. Как видно, теоретически найденные зависимости $\varepsilon_1(\omega)$, $\varepsilon_2(\omega)$, $\alpha(\omega)$ и $R(\omega)$ для Ge и InP согласуются с экспериментальными данными. Положение и число пиков, найденных из эксперимента, воспроизведены в теоретическом расчете. Спектральные зависимости исследуемых параметров содержат в себе все основные

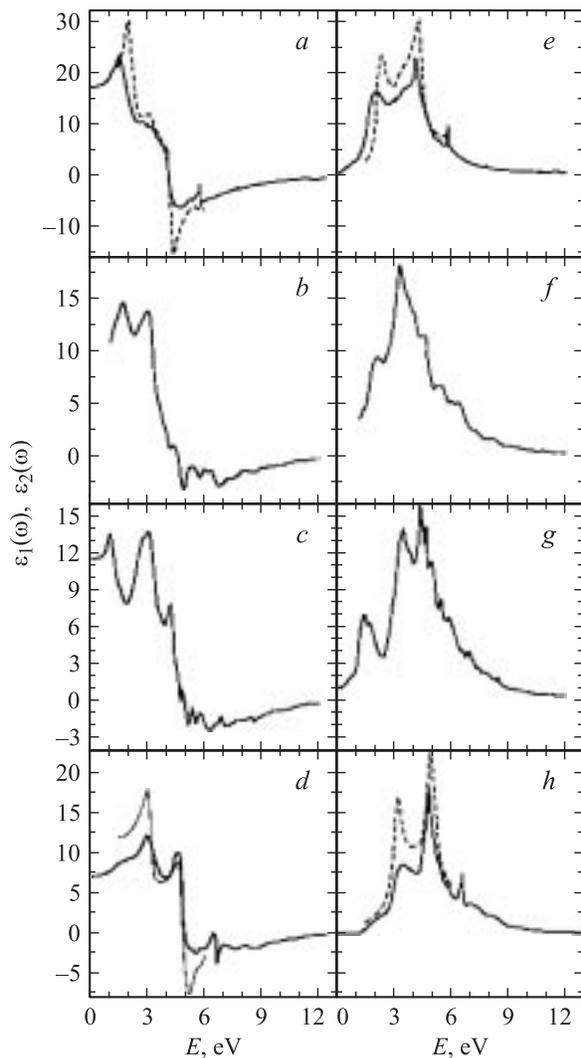


Рис. 1. Зависимость реальной $\epsilon_1(\omega)$ (*a-d*) и мнимой $\epsilon_2(\omega)$ (*e-h*) части диэлектрической функций для Ge (*a, e*), $(\text{Ge}_2)_{0.5}(\text{InP})_{0.5}$ (*b, f*), $(\text{Ge}_2)_{0.25}(\text{InP})_{0.75}$ (*c, g*), InP (*d, h*). Проведено сравнение теоретических результатов (сплошные кривые) с экспериментальными данным [7] (тире) для Ge (*a, b*) и InP (*d, h*).

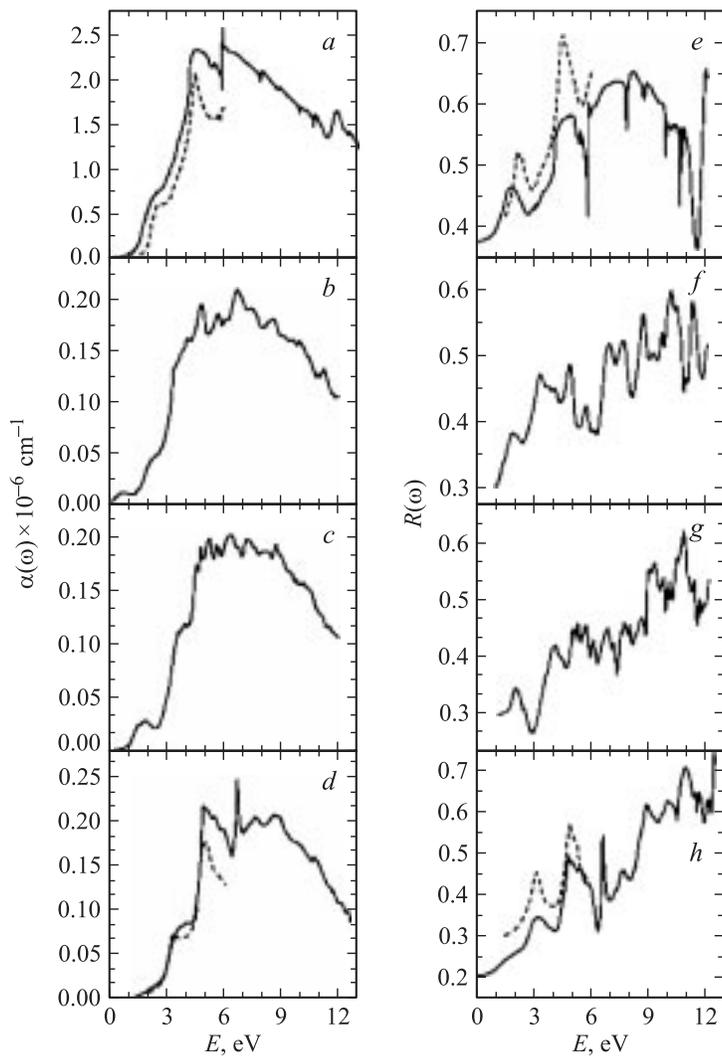


Рис. 2. Спектральные распределения коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ (a-d) и отражения $R(\omega)$ (e-h) для Ge (a, e), $(\text{Ge}_2)_{0.5}(\text{InP})_{0.5}$ (b, f), $(\text{Ge}_2)_{0.25}(\text{InP})_{0.75}$ (c, g) и InP (d-h). Проведено сравнение теоретических результатов (сплошные кривые) с экспериментальными данным [7] (тире) для Ge (a, b) и InP (d, h).

Энергии (eV) основных пиков в спектральном распределении мнимой части диэлектрической функции, полученные из ab initio вычислений и найденные экспериментально для Ge, InP и твердых растворов $(Ge_2)_{1-x}(InP)_x$ с различным составом $x = 0.5$ и 0.75

Переход	Ge		$(Ge_2)_{0.5}(InP)_{0.5}$	$(Ge_2)_{0.25}(InP)_{0.75}$	InP	
	Ab initio	Expt. [7]			Ab initio	Expt. [7]
E_0		0.898			0.922	2.869
$E_0 + \Delta_0$	1.2	1.184	1.40	1.70		2.949
E_1	2.05	2.222	2.10	3.399	3.499	3.780
$E_1 + \Delta_1$		2.41			3.775	3.835
E'_0	3.206	3.206	3.299	4.360		4.72
$E'_0 + \Delta'_0$		3.39				4.88
E_2	4.1	4.49	4.699	4.70	4.790	5.22
E'_1	5.65	5.65	5.50	6.59	6.575	6.8

особенности полупроводников со структурой цинковой обманки. Видны общеизвестные пики E_0 , E_1 и E_2 . При этом использована система обозначения пиков, предложенная в [10]. Индексы 0, 1 и 2 означают междузонные переходы в центральной точке зоны Бриллюэна (E_0), вдоль направлений $\langle 1, 0, 0 \rangle$, $\langle 0, 1, 0 \rangle$, $\langle 0, 0, 1 \rangle$ (E_1) и восьми эквивалентных направлений $\langle 1, 1, 1 \rangle$ (E_2) соответственно. Получены также более слабые пики E'_0 , E'_1 , связанные с переходами между валентной зоной и более высокими зонами проводимости в центре зоны и вдоль направлений $\langle 111 \rangle$ соответственно [7]. Как известно [7], в E_2 содержатся вклады переходов, происходящих в широкой области зоны Бриллюэна вблизи границ в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$.

Так как в расчете пренебрегли спин-орбитальным взаимодействием, спин-отщепленная часть оптических параметров отсутствует в спектральном распределении. Кроме того, ab initio пакет, использованный в данной работе, не учитывает кулоновского взаимодействия электрона с оставшейся дыркой. В результате пики E_1 оказались более слабыми, а пики E_2 более сильными по сравнению со случаем, когда кулоновское взаимодействие учтено. В таблице приводятся полученные в данной работе с помощью ab initio вычислений и экспериментально значения энергий, соответствующие упомянутым выше основным пикам.

На зависимости $\varepsilon_2(\omega)$ Ge и InP отчетливо видны два пика E_1 и E_2 , причем высота пика E_2 больше, чем у E_1 . Кроме того, высота обоих пиков E_1 и E_2 в Ge больше, чем в InP. По мере добавления молекул InP в матрицу Ge высота пиков претерпевает существенные изменения. Анализ рис. 1 показывает, что высота пика E_1 в $(\text{Ge}_2)_{0.5}(\text{InP})_{0.5}$ почти в два раза меньше, чем у Ge. По мере дальнейшего увеличения содержания молекул InP высота этого пика очень слабо убывает. Она почти не меняется при переходе от $(\text{Ge}_2)_{0.25}(\text{InP})_{0.75}$ в InP. Высота пика E_2 меняется немонотонно при монотонном возрастании содержания молекул InP в матрице Ge. Она убывает при возрастании x от 0 до 0.5, а затем возрастает. На зависимости $\varepsilon_2(\omega)$ Ge виден слабый пик E'_0 при энергии 3.206 eV. Высота этого пика почти не меняется при возрастании x от 0.0 до 0.5. Однако при более высоких значениях x ($0.5 < x \leq 0.75$) она убывает и почти не меняется при $0.75 < x \leq 10$.

В интервале энергий 3–4 eV функция $\varepsilon_2(\omega)$ быстро растет до абсолютного максимума E_2 , обусловленного переходами, как у всех кристаллов данного типа решетки это происходит в широкой области зоны Бриллюэна вблизи границ в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$. Положение максимума E_2 для данного состава находится в 3.9 eV и имеет интенсивность около 17.6. Кроме того, при энергиях 4.5, 5.4 и 6.3 eV наблюдаются дополнительные плечи. В спектре $\varepsilon_2(\omega)$ с составом $x = 0.75$ пик E_1 находится в области энергий 1.0–3.5 eV и имеет максимум при 1.57 eV. Как видно, $\varepsilon_2(\omega)$ быстро растет в интервале 2.5–3.5 eV до абсолютного максимума E_2 и в этой области имеет сложную структуру. Кроме того, этот пик расщеплен на два пика с разными значениями интенсивностей. Сравнивая спектры $\varepsilon_2(\omega)$ для разных составов, можно определить, что пики E_2 состава $x = 0.75$ смещены относительно соответствующего пика для $x = 0.5$ в область высоких энергий.

Анализ спектра $\varepsilon_1(\omega)$ на рис. 1 показывает, что максимум первого со стороны низкой энергии пика Ge находится при энергии 1.55 eV, а в области энергий 2.1–4.5 eV наблюдается плечо. Соответствующий максимум InP расположен при 2.95 eV, и при 4.57 eV наблюдается локальный максимум с меньшей интенсивностью. Анализируя рис. 1, $a-d$, можно наблюдать эволюцию максимумов твердого раствора от $x = 0$ (Ge) до $x = 1$ (InP). Этот пик в растворе с составом $x = 0.5$ находится в интервале энергий 2.0–3.0 eV и имеет максимум при 2.3 eV интенсивностью 8.1. Как видно, при $x = 0.5$ основной максимум расщеплен на

два пика при 1.55 и 2.95 eV, второй из которых обусловлен появлением молекулы InP в твердом растворе. При $x = 0.75$ влияние молекул InP существенно усиливается, и плечо, найденное при $x = 0.5$ в области энергий 4.5 eV, превратится в локальный максимум, обнаруженный в спектре $\varepsilon_1(\omega)$ InP.

На спектральной зависимости коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ (рис. 2, *a, b, c, d*) исследуемого твердого раствора имеются максимумы при 2.0, 3.9, 5.1, 6.2 и 10.0 eV. Резкий подъем графика наблюдается в интервале энергии 3.0–5.0 eV. Как видно, фундаментальный край поглощения (E_0) для Ge и InP соответствует литературным данным. В твердом растворе с $x = 0.5$ положение пика E_0 смещено в длинноволновую область спектра относительно E_0 для Ge и находится около 0.5 eV (рис. 2, *b*), т. е. ширина запрещенной зоны полупроводника уменьшается. С ростом x ($x = 0.75$) рассматриваемый пик смещается до 1.3 eV и его интенсивность становится существенной. Анализ спектра поглощения показывает, что плечо в области 2.0–3.0 eV для Ge и раствора с $x = 0.5$ соответствует вышеупомянутому пику E_1 . Этот пик в растворе с $x = 0.75$ и в InP находится при 3.0–4.0 eV и вполне соответствует литературным данным [8]. Абсолютные максимумы спектров поглощения E_2 , наблюдаемые в спектрах $\varepsilon_2(\omega)$, наблюдаются и в этом случае. Их положение соответствует положению этих величин в вышеупомянутых спектрах $\varepsilon_2(\omega)$. Сравнивая соответствующие графики твердого раствора, германия и фосфида индия, можно определить, что максимум при 5.1 eV обусловлен молекулой InP, а при 6.2 eV — молекулой Ge_2 .

Из графиков коэффициента отражения $R(\omega)$ (рис. 2) твердого раствора с $x = 0.75$ отчетливо видны максимумы при энергиях 1.1, 3.5, 4.5, 6.2 и 10.5 eV. Сравнительный анализ спектра $R(\omega)$ этого состава показывает, что пики при 3.5 и 5.2 eV обусловлены молекулой InP, в то время как при 4.5 и 6.2 eV — молекулой Ge_2 . В твердом растворе составом $x = 0.5$ пики расположены при 2.0, 3.2, 4.5, 6.9, 7.7 и 8.9 eV. В этом случае пик в 3.2 eV обусловлен молекулами InP, а при 5.9 eV — молекулой Ge_2 . Надо отметить, что значение данного коэффициента для разных составов твердого раствора во всем интервале энергий отличается незначительно.

Таким образом, в работе представлены результаты исследования оптических свойств Ge, InP и твердого раствора $(\text{Ge}_2)_{1-x}(\text{InP})_x$ составом $x = 0.5$ и 0.75 с использованием *ab initio* расчетов электронной струк-

туры с помощью самосогласованного скалярно-релятивистского полнопотенциального метода линейных muffin-tin-орбиталей и теории функционала плотности в рамках локальной плотности заряда. Исследовано спектральное распределение мнимой и реальной части диэлектрической функции, коэффициента поглощения и отражения. Положение пиков и их высота на спектральном распределении оптических параметров Ge и InP, найденные с помощью теории, согласуются с экспериментальными данными. Показан ход изменения оптических параметров при возрастании содержания молекул InP в матрице кристаллов Ge. Показано, что величины коэффициента поглощения и отражения исследованных составов твердых растворов $x = 0.5$ и 0.75 близки к InP. Используя систему обозначений, предложенную в [10], проведена интерпретация природы пиков на спектральном распределении оптических параметров.

Список литературы

- [1] Саидов А.С., Кошчанов Э.А., Исмаилов Ш.К., Раззаков А.Ш. // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 24. С. 37–40.
- [2] Губанов А.И., Полубатко А.М. // ФТП. 1982. Т. 7. В. 4. С. 753–754.
- [3] Methfessel M., Scheffler M. // Physica B. 1991. V. 172. P. 175.
- [4] Hohenberg P., Kohn W. // Phys. Rev. B. 1964. V. 136. P. 864.
- [5] Kohn W., Sham L.J. // Phys. Rev. 1965. V. 140. P. A1133.
- [6] Vosko S.H., Wilk L., Nusair M. // Canadian J. Phys. 1980. V. 58. P. 1200.
- [7] Гавриленко В., Грехов А. Оптические свойства полупроводников: Справочник. Киев, 1987. С. 243–250.
- [8] Питер Ю., Кардона М. Основы физики полупроводников. М.: Наука, 2003. С. 71.
- [9] Виклюк Я.И., Дейлюк В.Г., Золотарев С.В. // ФТП. 2002. Т. 36. В. 8. С. 925–931.
- [10] Cardona M. Modulation spectroscopy. Solid State Physics. N.Y.: Academic. 1969. Suppl. II. P. 55–65.