

## ПАРАМЕТРЫ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$

Лупал М. В., Лютович К. Л., Панов М. Ф.,  
Пихтин А. Н., Попов В. А.

Фотоэлектрическими методами исследованы зависимости параметров зонной структуры  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  от состава материала. Измерения проведены при температурах 10, 85 и 300 К в основном на образцах, полученных газофазной эпитаксией. Представлены зависимости для зазоров  $\Gamma_{8v}^+ - \Gamma_{7c}^-$ ,  $\Gamma_{8v}^+ - \Gamma_{8c}^-$ ,  $\Gamma_{8v}^+ - \Delta_{5c}$ ,  $\Gamma_{8v}^+ - L_{6c}^+$  и зазора  $E_1$ .

Необходимость детального изучения зонной структуры твердых растворов  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  связана с возросшим в последнее время интересом к этой системе, во-первых, как к модельному объекту для исследования влияния изменения зонной структуры, разупорядочения и размерных эффектов на свойства вещества, во-вторых, как к материалу для создания СВЧ приборов, приборов на поверхностных акустических волнах и приемников излучения для волоконно-оптических линий связи [1, 2].

К настоящему времени сравнительно хорошо исследованы (главным образом по спектрам отражения) прямые зазоры в зонной структуре  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ , чего нельзя сказать о непрямых зазорах. До сих пор приходится пользоваться приближительными данными по запрещенной зоне этих материалов, полученными в 1958 г. [3]. Наиболее подробные сведения по прямым зазорам были получены с помощью электроотражения и представлены в [4]. Недавно были опубликованы результаты эллипсометрических измерений [2], позволившие уточнить зависимость зазора  $E_1$  от состава  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  и рассчитать спектры поглощения до энергии 4.5 эВ.

В настоящей работе представлены результаты исследования зонной структуры  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ , полученные главным образом фотоэлектрическими методами. Преимущества этих методов проявляются в первую очередь в области малых значений коэффициентов поглощения (плотности состояний), что весьма существенно при исследовании непрямых переходов.

В работе исследовались монокристаллические образцы твердых растворов  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ , в числе которых были пленки *n*-типа толщиной 3–4 мкм, полученные на кремниевой подложке *p*-типа методом газофазной эпитаксии, а также объемные образцы чистых кремния, германия и твердого раствора  $\text{Si}_{0.115}\text{Ge}_{0.885}$ .

Образцы подвергались электронографическому исследованию, показавшему высокое совершенство выращенных слоев. Состав материала пленок и его однородность как по толщине, так и по поверхности контролировались с помощью рентгеноспектрального микроанализа с относительной точностью не хуже 0.05. Контакты к образцам для фотоэлектрических изменений изготовлялись лазерным способом по методике, описанной в [5].

Изучение зонной структуры твердых растворов  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  производилось путем анализа спектров фототовета. В случае эпитаксиальных образцов измерялись спектральные зависимости фотоздс, возникающей в *p-n*-гетероструктуре, в случае объемных образцов — фотопроводимость. Применялось также и измерение спектра поглощения в пленке. Измерения производились при температурах 300, 85 и 10 К с разрешением не хуже 0.006 в диапазоне 0.64–0.98 и 2.00–2.64, 0.002 — в диапазоне 0.98–2.00, 0.04 — в диапазоне 2.64–3.60 эВ.

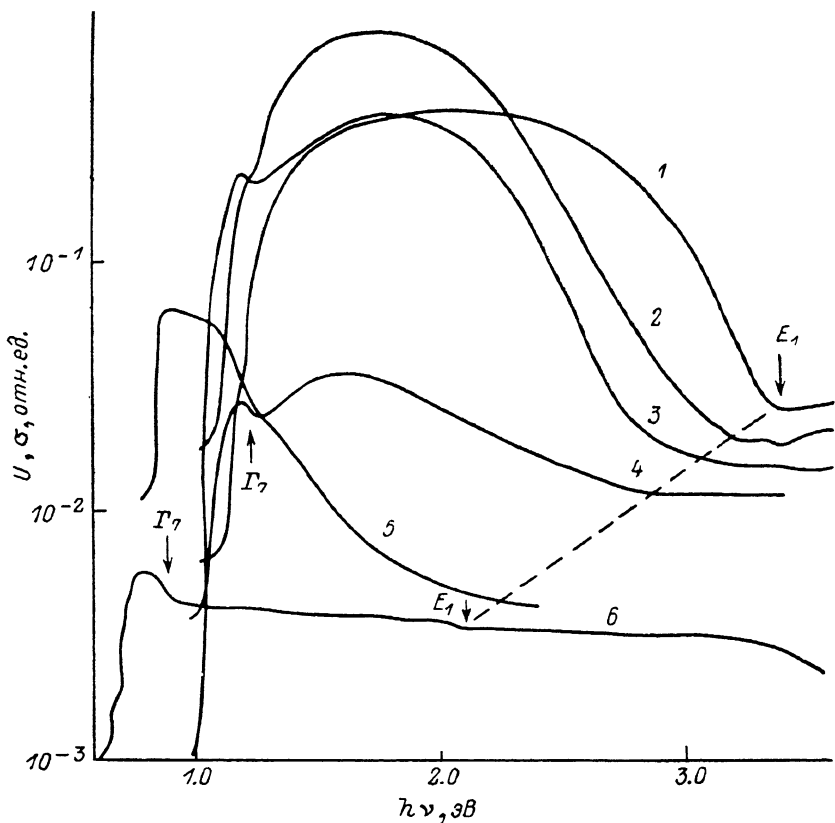


Рис. 1. Спектры фотоэмиссии и фотопроводимости  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  при  $T=85$  К для разных составов  $x$ .  
 $x$ : 1 — 1.0, 2 — 0.850, 3 — 0.694, 4 — 0.613, 5 — 0.115, 6 — 0. 1—4 — фотоэмиссия, 5, 6 — фотопроводимость.

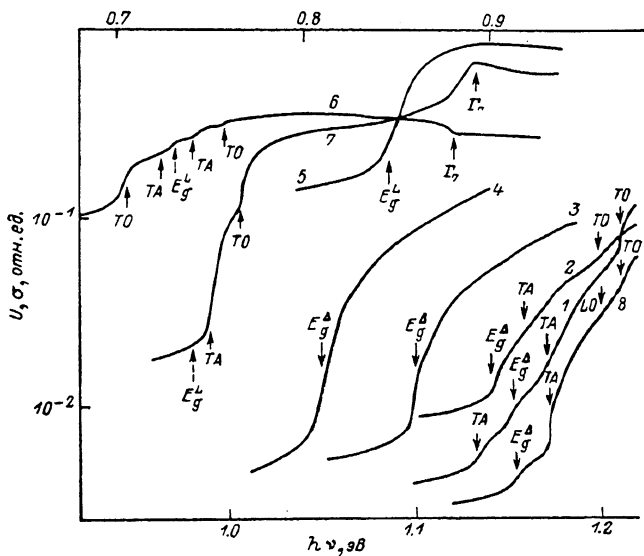


Рис. 2. Спектры фотоэмиссии (1—4, 7, 8) и фотопроводимости (5, 6) в области непрямых переходов для разных составов  $x$ .  
 $x$ : 1, 8 — 1.0, 2 — 0.943, 3 — 0.850, 4 — 0.694, 5 — 0.100, 6, 7 — 0.  $T$ , К: 1—6 — 85, 7, 8 — 10. Верхняя шкала — для 5—7, нижняя — для 1—4, 8.

На рис. 1 представлены спектры фотоответа образцов Ge, Si и твердых растворов  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  в области собственного поглощения, а на рис. 2 отдельно изображены спектры в области непрямых переходов. Все спектры фотоэдс и фотопроводимости состоят из двух участков, имеющих качественное различие, связанное с величиной параметра  $ad$ , где  $\alpha$  — коэффициент поглощения,  $d$  — толщина эпитаксиального слоя. Первый характеризуется малым  $\alpha$  и  $ad < 1$ . При этом выполняется условие пропорциональности фотосигнала коэффициенту поглощения. Здесь спектры имеют характерные особенности, обусловленные образованием непрямых экситонов. Второй соответствует большим  $\alpha$  ( $ad > 1$ ). В этом случае поведение спектра фотоответа определяется тем фактором, что увеличивающийся с ростом энергии фотона коэффициент поглощения приводит к стягиванию поглощающего излучения в узкую приповерхностную область, наиболее богатую дефектами структуры и обладающую меньшим временем жизни носителей. При этом спектр фотоответа отклоняется от спектра коэффициента поглощения. Включение же в механизм поглощения света новых оптических переходов с ростом энергии фотона сопровождается уменьшением или (реже) увеличением сигнала фото-

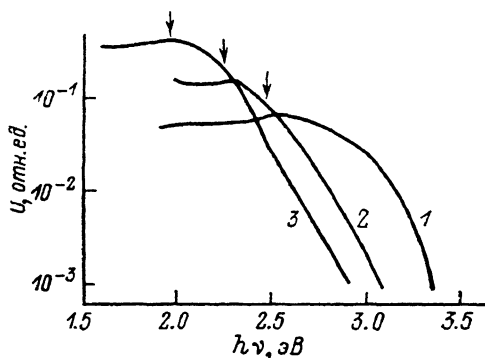


Рис. 3. Спектры фотоэдс  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  в области переходов в  $L_6^+$ -минимум при  $T=10$  К для разных составов  $x$ .  
 $x$ : 1 — 1.0, 2 — 0.943, 3 — 0.850.

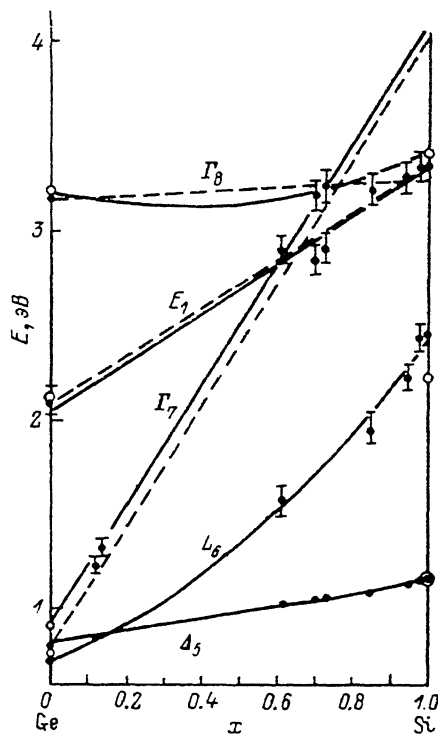


Рис. 4. Энергетические зазоры в твердом растворе  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ .

отклика в зависимости от структуры, геометрии образца, его электрических параметров и типа перехода.

На форму спектров фотоответа гетеропереходов  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}/\text{Si}$ , внося свой вклад в фотоэдс, влияет также и подложка, которая проявляется с началом собственных переходов в кремнии. Это выражается в замедлении роста фотоэдс или даже ее уменьшении в районе начала наиболее резко проявляющихся в кремнии переходов с испусканием  $TO$ -фононов ( $h\nu \approx 1.2$  эВ). Указанный эффект, усиливающийся со сдвигом состава пленки в сторону увеличения содержания германия, по-видимому, связан с наличием вблизи границы гетероперехода большого количества состояний, играющих роль ловушек и центров рекомбинации.

Проведена оценка возможного влияния роста квантового выхода, которое должно иметь место при энергиях фотона более 3 эВ. При этом использовались экспериментальные данные из работы [6]. Результаты показали, что влияние этого явления на форму полученных в настоящей работе спектров пренебрежимо мало.

Спектры фотоэдс в области края собственного поглощения при 85 К приведены на рис. 2. Там же приведены данные для Si и Ge при 10 К. Кривые имеют характерные особенности, связанные с порогами непрямых экситонных перехо-

дов в  $\Delta_5$ -минимумом, осуществляющихся как с участием, так и без участия фононов. Энергии фононов, определенные из этих экспериментов, составили для кремния  $E_{T0}=58$ ,  $E_{TA}=18$ ,  $E_{LA}=48$  мэВ, для германия  $E_{T0}=28$ ,  $E_{TA}=9$  мэВ, что хорошо согласуется с известными результатами [7].

При всех температурах отчетливо виден рост интенсивности бесфононных переходов по мере удаления состава от кремния к германию. Следует отметить наличие бесфононной компоненты в «чистом» кремнии при ее отсутствии в «чистом» германии (рис. 2). Данное явление, очевидно, связано с большим количеством дефектов в кремниевых образцах.

Величина экситонной запрещенной зоны в твердых растворах германий—кремний определялась по положению начала бесфононных переходов путем аппроксимации соответствующего участка спектра теоретической зависимостью  $A\sqrt{h\nu - E_{gx}}$  [8]. Величина  $E_{gx}$  для германия определялась по фононным компонентам.

Определение энергий переходов в более высокие состояния —  $\Gamma_7^-$ ,  $\Gamma_8^-$ ,  $L_6^+$ ,  $E_1$  — производилось по положению соответствующих особенностей на спектрах фотоответа (рис. 1—3). Эти особенности проявляются в виде увеличения или уменьшения сигнала в зависимости от способа измерения и структуры образца.

В отличие от составов вблизи германия в составах, близких к кремнию, переходы в  $\Gamma_7^-$  и  $\Gamma_8^-$ -минимумы происходят на фоне интенсивных переходов  $E_1$ . В этой области коэффициент поглощения достигает величин  $10^8 \text{ см}^{-1}$  [2], что значительно больше, чем в области  $\Gamma_7^-$ -переходов в германии ( $\alpha \approx 10^4 \text{ см}^{-1}$ ). Поэтому отсутствие в спектре фотосигнала особенностей, связанных с  $\Gamma_7^-$  и  $\Gamma_8^-$ -переходами, объясняется тем, что фотоответ практически не зависит от коэффициента поглощения в данной области спектра.

Переходы в  $L_6^+$ -минимум в составах, где его энергетическая высота превышает высоту  $\Delta_5$ -минимума, достаточно отчетливо проявлялись только при температуре 10 К для составов  $0.613 \leq x \leq 1$  (рис. 3).

Экспериментальные значения энергетических зазоров для различных составов представлены на рис. 4. Там же изображены (кружками) аналогичные данные для  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  из работы [9]. По полученным результатам с использованием литературных данных рассчитаны зависимости от составов при  $T=10$  К для энергий экситонов, образованных состояниями  $\Gamma_6$  валентной зоны и состояниями  $\Delta_5$ ,  $L_6^+$ ,  $\Gamma_7^-$ ,  $\Gamma_8^-$  зоны проводимости, а также для зазора  $E_1$ :  $E(L_6^+) = 0.755 + 1.679x - 1.08x(1-x)$ ,  $E(\Delta_5) = 0.833 + 0.326x - 0.033x(1-x)$ ,  $E(\Gamma_7^-) = 4.10x + 0.89(1-x)$ ,  $E(\Gamma_8^-) = 3.20 + 0.22x - 0.61x(1-x)$ . Соответствующие «переходные составы»  $x_c(L_6^+ - \Delta_5) \approx 0.16$ ,  $x_c(\Gamma_7^- - \Gamma_8^-) \approx 0.74$ .

Определенные в настоящей работе зависимости изображены на рис. 4 сплошными линиями. Там же для сравнения штриховыми линиями приведены зависимости для прямых зазоров, полученные по данным электроотражения при комнатной температуре [4]. Зависимость  $E_1 = 2.108 + 1.287x - 0.153x(1-x)$ , полученная в [2], с хорошей точностью описывает данные, полученные в настоящей работе.

#### Список литературы

- [1] People R. // IEEE J. Quant. Electron. 1986. V. QE-22. P. 1696—1710.
- [2] Humlíček J., Garriga M., Alonso M. I., Cardona M. // J. Appl. Phys. 1989. V. 65. N 7. P. 2827—2832.
- [3] Braunstein R., Moore A. R., Herman F. // Phys. Rev. B. 1958. V. 109. N 3. P. 695—712.
- [4] Kline I. S., Pollak F. H., Cardona M. // Helv. Phys. Acta. 1968. V. 41. N 6/7. P. 968—977.
- [5] Пихтин А. Н., Попов В. А., Яськов Д. А. // Приборы и техн. эксперим. 1970. № 2. С. 238—239.
- [6] Geist J., Wang C. S. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 8. P. 4841—4847.
- [7] Landolt H., Börstein R. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. New Series. V. 17. Semiconductors. Subv. A. N. Y., 1982.
- [8] Пихтин А. Н. // ФТП. 1977. Т. 11. В. 3. С. 425—455.
- [9] Chelikowsky J. R., Cohen M. L. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. N 2. P. 556—582.