

Край собственного поглощения полупроводниковых твердых растворов с прямой структурой энергетических зон

© А.Н. Пихтин[¶], Х.Х. Хегази

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет (ЛЭТИ),
197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 1 апреля 2009 г. Принята к печати 6 апреля 2009 г.)

Приведена удобная для практического применения методика расчетов спектров фундаментального поглощения полупроводниковых твердых растворов с прямой структурой энергетических зон. Методика базируется на знании спектров собственного поглощения составляющих твердый раствор бинарных соединений, учитывает непараболичность зоны проводимости и содержит всего один дополнительный „подгоночный параметр“, определяющий неоднородное уширение спектров. Она апробирована на наиболее изученных и важных в прикладном отношении твердых растворах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, изорешеточном с GaAs ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}$) $_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$, изорешеточном с InP $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ и может быть применена к другим соединениям как $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, так и $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$. Полученные результаты позволяют рассчитать спектры собственной люминесценции твердых растворов.

PACS: 78.20.Bh, 78.20.Ci, 78.55.Cr, 78.66.Fd

1. Введение

После того как в [1] было показано, что твердые растворы в системе $\text{GaAs}-\text{AlAs}$ близки к идеальным и с их помощью можно реализовать все преимущества гетероструктур, интерес к ним резко возрос. Особое значение имеют твердые растворы полупроводниковых соединений $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ с прямой структурой энергетических зон. Их применение в оптоэлектронике позволило создать инжекционные лазеры, светодиоды, оптические модуляторы и фотоприемники с рекордными характеристиками [2]. Свойства бинарных соединений $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, в том числе их спектры фундаментального оптического поглощения, изучены довольно хорошо и представлены в ряде справочников и обзоров [3–7]. Для твердых растворов экспериментальные данные ограничены узким кругом как типов материалов, так и составов. Понятно, что экспериментальным путем получить данные по всем составам твердых растворов не представляется возможным. Поэтому особое значение приобретает моделирование их свойств, позволяющее предсказать характеристики твердого раствора A_xB_{1-x} на основе измеренных параметров составляющих его компонент А и В.

Наиболее полно изучены свойства системы $\text{GaAs}-\text{AlAs}$, т.е. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, которая выполняла роль модельного объекта для расчета оптических параметров твердых растворов в зависимости от состава (от x). Были предложены несколько методов. Относительно простая модель [8] описывала мнимую часть диэлектрической функции ϵ_2 в области собственного поглощения с помощью четырех затухающих осцилляторов. В дальнейшем она была модифицирована в [9,10] и согласие с экспериментом было улучшено за счет введения дополнительных подгоночных параметров. Феноменологическая модель [11] содержала девять осцилляторов. Для моделирования оптических свойств $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ во всем диапазоне составов требовалось 144 (!) численных значений параметров осцилляторов. В модели [12]

учитывались различные механизмы уширения, и для согласования с экспериментальными результатами в спектральной области $\hbar\omega = 1.5-6$ эВ для составов с $x = 0-0.8$ требовалось 119 параметров. Даже в последней опубликованной работе [13] для моделирования диэлектрической функции $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ использовалось несколько десятков подгоночных параметров.

Все представленные модели не давали хорошего согласия с экспериментальными данными в наиболее важной области спектра — вблизи края фундаментального поглощения. В настоящей работе предполагается метод расчета спектров собственного поглощения полупроводниковых твердых растворов A_xB_{1-x} на основе известных спектров поглощения бинарных соединений А и В, содержащий минимум дополнительных подгоночных параметров, что делает его универсальным и удобным для практического применения. Проведенное сравнение с экспериментальными данными для трехкомпонентных твердых растворов $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$, четырехкомпонентных твердых растворов ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}$) $_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ подтвердило дееспособность предложенного метода. Более того, полученные данные позволяют рассчитать спектр собственной люминесценции, что проиллюстрировано в заключительной части работы.

2. Край собственного (фундаментального) поглощения — модельные представления

Для прямых разрешенных оптических переходов между валентной зоной и зоной проводимости при условии их параболичности спектр коэффициента поглощения описывается классической формулой [14,15]

$$k_{\omega}^0 = \frac{e^2(2m_r)^{3/2}}{\pi n c m_0 \hbar^2} (\hbar\omega - E_0)^{1/2} f_{vc}. \quad (1)$$

Здесь m_r — приведенная эффективная масса, $m_r^{-1} = m_h^{-1} + m_e^{-1}$, $E_0 = E_g^{\Gamma}$ — ширина запрещенной зоны

[¶] E-mail: ANPikhtin@mail.eltech.ru

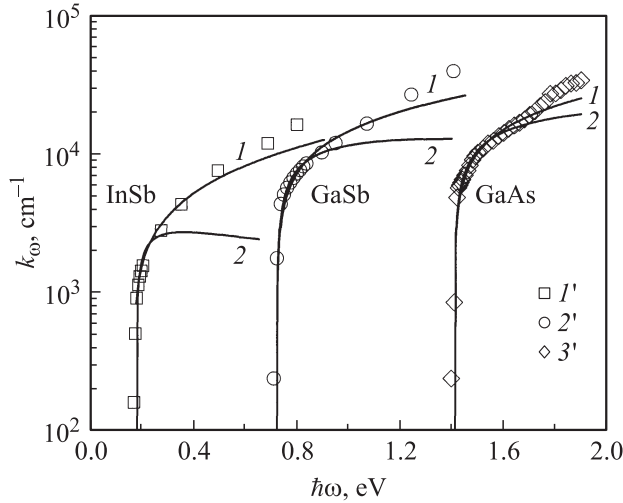


Рис. 1. Теоретическая аппроксимация края фундаментального поглощения InSb, GaSb и GaAs при $T = 300$ К. Сплошные кривые — расчет: 1 — (4), 2 — (3). Экспериментальные данные: 1' — InSb [5], 2' — GaSb [18], 3' — GaAs [17].

при $k = 0$, $\hbar\omega$ — энергия фотона, f_{vc} — сила осциллятора, связанная с матричным элементом перехода M как

$$f_{vc} = \frac{2}{3m_r\hbar\omega} |M|^2. \quad (2)$$

Поскольку точное вычисление M затруднено и для разрешенных в дипольном приближении переходов $|M|^2 = \text{const}$, соотношение (1) удобно переписать в виде

$$k_\omega^0 = \text{const} \frac{(2m_r)^{3/2}}{\hbar\omega} (\hbar\omega - E_0)^{1/2}. \quad (3)$$

Учет непараболичности зоны проводимости, основанный на трехзонной модели Кейна и выполненный в [16], приводит к трансформации общепринятой корневой зависимости (3) в выражение

$$k_\omega^0 = C \left(\frac{2m_r}{E_0} \right)^{3/2} \sqrt{(\hbar\omega)^2 - E_0^2}, \quad (4)$$

где $C = \text{const}$. В непосредственной близости к E_0 спектры (3) и (4) с точностью до постоянных множителей совпадают, поскольку при $\hbar\omega \approx E_0$ имеем $\sqrt{(\hbar\omega)^2 - E_0^2} \approx \sqrt{2E_0} \sqrt{\hbar\omega - E_0}$.

Сравнение с экспериментальными данными для целого ряда бинарных соединений $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ показало, что при удалении от E_0 соотношение (4) лучше описывает их спектр собственного поглощения. В качестве примера на рис. 1 результаты расчетов по (3) и (4) сравниваются с экспериментальными данными [17] для эпитаксиальных слоев GaAs высокой степени совершенства, а также с данными для InSb [5] и GaSb [18]. Нами также были выполнены расчеты согласно 8-зонной модели Кейна по соотношениям [19] применительно к арсениду галлия. Оказалось, что значительное усложнение модели приводит лишь к незначительному отклонению от (4), в то

время как (4) существенно лучше описывает экспериментальные данные по сравнению с (3). Аналогичные результаты были получены нами для InP.

Формулы (1), (3) и (4) не учитывают конечность времени жизни, взаимодействия с фононами, примесями и т. п., приводящие к уширению спектров. Для идеальных кристаллов это — однородное уширение, описываемое функцией Лоренца для каждого из резонансов:

$$g_L(\omega) = \frac{\Delta\omega_L}{2\pi} \frac{1}{(\omega_0 - \omega)^2 + (\Delta\omega_L/2)^2}, \quad (5)$$

где $\Delta\omega_L$ — ширина линии на уровне 0.5 от максимума, а ω_0 — резонансная частота. Влияние однородного уширения легко учесть сверткой функций (3), (4) с (5), так что для (4) имеем

$$k_\omega = k_\omega^0 * g_L = C' \frac{\gamma}{2\pi} \int_0^{E_1} \frac{\sqrt{E^2 - E_0^2}}{(E - \hbar\omega)^2 + (\gamma/2)^2} dE. \quad (6)$$

Здесь $\gamma = \hbar\Delta\omega_L$. В твердых растворах принципиально важную роль играют эффекты „беспорядка“, вызванные статистически неупорядоченным распределением атомов составляющих компонентов по узлам соответствующей подрешетки. Вызванный этим беспорядком флуктуирующий потенциал может приводить к кажущемуся нарушению правил отбора по волновому вектору при непрямых оптических переходах [20]. Для прямых, вертикальных оптических переходов, разрешенных в первом порядке теории возмущений, правила отбора по волновому вектору сохраняются, и для них справедливо приближение виртуального кристалла. В этом случае матричный элемент перехода M , входящий в (2) и (4), плавно (в первом приближении — линейно) изменяется с составом твердого раствора [20]. Микроскопические флуктуации состава, существующие даже в идеальном твердом растворе, приводят к неоднородному уширению спектров, описываемому функцией Гаусса:

$$g_G(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta\omega_G} \exp\left[-\frac{(\omega - \omega_0)^2}{2(\Delta\omega_G)^2}\right]. \quad (7)$$

В отличие от (5) здесь ширина линии на уровне 0.5 от максимума определяется как $\text{FWHM} = 2\sqrt{2 \ln 2} \Delta\omega_G$. Таким образом, край собственного поглощения для прямых разрешенных оптических переходов в твердых растворах определяется сверткой функций (4) и (7), т. е.

$$\begin{aligned} k_\omega &= k_\omega^0 * g_G \\ &= A' \left(\frac{2m_r}{E_0} \right)^{3/2} \frac{1}{\Gamma\sqrt{2\pi}} \int_0^{E_1} \sqrt{E^2 - E_0^2} \exp\left[-\frac{(\hbar\omega - E)^2}{2\Gamma^2}\right] dE \\ &\approx \frac{A}{\Gamma\sqrt{2\pi}} \int_{E_0 - N\Gamma}^{E_1} \sqrt{E^2 - E_0^2} \exp\left[-\frac{(\hbar\omega - E)^2}{2\Gamma^2}\right] dE. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь $\Gamma = \hbar\Delta\omega_G$, а в коэффициент A включены приведенная эффективная масса m_r и пороговая энергия

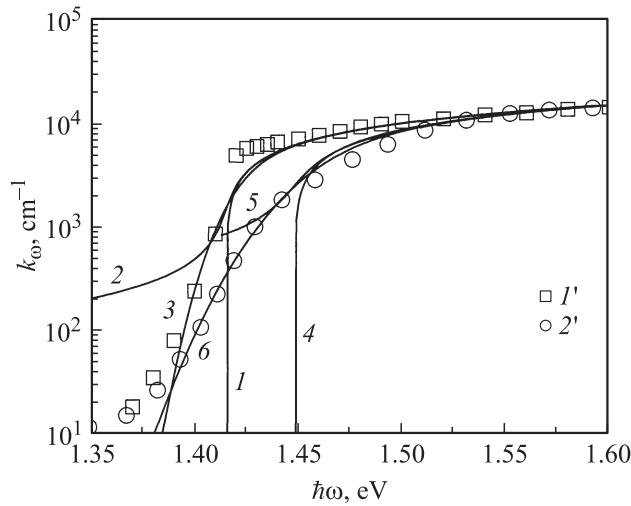


Рис. 2. Сравнение функций (4), (6) и (8) с экспериментальными данными по краю собственного поглощения арсенида галлия при $T = 300$ К. Сплошные кривые — расчет для нелегированного GaAs (1–3) и легированного до $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ GaAs (4–6): 1, 4 — (4); 2, 5 — (6); 3, 6 — (8). 1', 2' — экспериментальные данные [3,17].

перехода $E_0 = E_g^\Gamma$. Интегрирование проводится от энергии E на Γ ниже пороговой E_0 . Обычно достаточно $N \approx 5$, поскольку при этой энергии функция (7) спадает практически до нуля. Верхний предел интегрирования выбирается из разумных соображений. В нашем случае он выбран до критической точки E_1 , соответствующей максимуму в спектре реальной части диэлектрической функции $\varepsilon_1(\hbar\omega)$.

На рис. 2 функции (4), (6) и (8) сравниваются между собой полулогарифмическом масштабе. Для определенности данные приведены для арсенида галлия при комнатной температуре ($T = 300$ К), $E_0 = 1.42$ эВ, $A = 2.5 \cdot 10^4 \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$. Выбраны два значения параметра уширения: $\Gamma = 8$ и 17 мэВ, что соответствует нелегированному и легированному приблизительно до 10^{18} см^{-3} n -GaAs. В последнем случае учтен сдвиг Бурштейна–Мосса, вызванный вырождением электронного газа [15] и равный 29.5 мэВ. Видно, что при энергии фотонов $\hbar\omega \geq E_0 + 3\Gamma$ (4) и (8) практически совпадают. Даже в чистых кристаллах GaAs функция (8) лучше согласуется с экспериментом в длинноволновой области. Это свидетельствует, что даже небольшое количество дефектов создает флуктуирующий потенциал, приводя к неоднородному уширению спектров (7), преобладающему над однородным (5). Это дает основание использовать формулу (8) для описания края собственного поглощения как в твердых растворах, так и в обычных кристаллах.

В проведенном выше рассмотрении не учитывалось кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой, точнее, — переходы в дискретные состояния экситонов. Переходы в непрерывный экситонный спектр учитываются неявным образом за счет увеличения по

сравнению с (2) входящей в коэффициент A эффективной силы осциллятора. Если величина уширения Γ превышает несколько энергий связи экситона E_{ex} (обычно $\Gamma \geq (2-3)E_{\text{ex}}$), то такой подход не требует дополнительной корректировки. В противном случае, который, как правило, реализуется в совершенных кристаллах при низких температурах, переходы в дискретные экситонные состояния можно учесть введением в (8) дополнительного слагаемого. В простейшем случае для однородно уширенных экситонных линий это слагаемое имеет вид

$$k_\omega^{\text{ex}} = \text{const} \sum_{n=1}^m \frac{1}{n^3} g_L \left(\hbar\omega - E_g + \frac{E_{\text{ex}}}{n^2} \right), \quad (9)$$

где $E_{\text{ex}}^n = E_{\text{ex}}/n^2$ — энергия связи водородоподобного n -го экситонного состояния, а его интенсивность уменьшается с квантовым числом n как $1/n^3$.

Суммирование в (9) достаточно провести, как правило, по низшим состояниям. Обратим внимание, что на рис. 1 и 2 в области $E_0 > \hbar\omega > (E_0 - E_{\text{ex}})$ наблюдается слабое превышение экспериментальных значений k_ω для чистого GaAs над рассчитанными по (8). Это как раз связано с переходами в дискретные экситонные состояния, которые в GaAs наблюдаются даже при комнатной температуре (энергия связи $E_{\text{ex}}^{\text{GaAs}} = 4.2$ мэВ).

При $\hbar\omega \geq E_0 + \Delta_{so}$ к рассмотренным переходам добавляются переходы с участием валентной подзоны V_3 , отщепленной спин-орбитальным взаимодействием на энергию Δ_{so} . Матричный элемент в (2) для таких переходов в полупроводниках со структурой сфалерита в 2 раза меньше. Тогда спектральная зависимость коэффициента поглощения может быть записана в виде

$$k_\omega^{so} = \frac{A}{2} \left(\frac{m_r^{so}}{m_r} \right)^{3/2} \left(\frac{E_0}{E_0 + \Delta_{so}} \right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Gamma} \times \int_{E_0 + \Delta_{so} - 5\Gamma}^{E_1} \sqrt{E^2 - (E_0 + \Delta_{so})^2} \exp \left[-\frac{(\hbar\omega - E)^2}{2\Gamma^2} \right] dE. \quad (10)$$

Здесь $(m_r^{so})^{-1} = (m_e^\Gamma)^{-1} + (m_h^{so})^{-1}$, Δ_{so} — величина спин-орбитального расщепления валентной зоны с эффективной массой m_h^{so} . Важно, что входящие в (8) и (10) коэффициенты A и Γ одинаковы и одинаково изменяются с изменением состава твердого раствора. Суммирование (10) с (8) хорошо описывает экспериментальные данные при $\hbar\omega \geq E_0 + \Delta_{so}$ для арсенида галлия и других бинарных соединений $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$.

Если матричные элементы для однопольных переходов можно с хорошим приближением считать изменяющимися линейно, то для энергетических зазоров линейное приближение оказывается недостаточным. Часто для E_0 твердого раствора можно ограничиться квадратичной зависимостью вида

$$E_0^{A_x B_{1-x}}(x) = xE_0^A + (1-x)E_0^B - cx(1-x), \quad (11)$$

где коэффициент нелинейности c положителен, его величина зависит от рассогласования постоянных решеток

Таблица 1. Энергии критических точек бинарных соединений $A^{III}B^V$ при 300 К

Бинарное соединение	Энергия критической точки, эВ		
	E_0	$E_0 + \Delta_{so}$	E_1
InSb	0.176	1.046	1.8
InAs	0.354	0.725	2.5
GaSb	0.725	1.485	2.035
InP	1.344	1.46	3.15
GaAs	1.422	1.779	2.91
GaP	2.78	2.88	3.7
AlAs	2.8	3.074	3.83
AlP	3.91	3.93	4.30

Таблица 2. Параметры нелинейности для энергетических зазоров E_0 , $E_0 + \Delta_{so}$ и E_1 трехкомпонентных твердых растворов [4,7,21]

Твердый раствор	Параметры нелинейности, эВ		
	$C(E_0)$	$C(E_0 + \Delta_{so})$	$C(E_1)$
(Ga,In)As	0.47	0.57	0.50
(Ga,In)P	0.65	0.80	0.60
In(P,As)	0.16	0.20	0.14
Ga(P,As)	0.21	0.18	0.21
(Al,In)P	0.38	0.3	0.3
(Al,Ga)As	0	0	0
(Al,Ga)P	0	0	0

бинарных соединений a_A и a_B [20]. Для твердых растворов полупроводниковых соединений III и V групп коэффициент c определен достаточно точно [7,21]. Аналогичные данные имеются и для величины Δ_{so} и энергетического зазора $E_0 + \Delta_{so}$. Соответствующие данные приведены в табл. 1 и 2.

Таким образом, если для конкретного твердого раствора известны зависимости $E_0(x) = E_g^\Gamma(x)$ и $\Delta_{so}(x)$, а также известны значения коэффициентов A составляющих его компонент, то достаточно всего одного параметра Γ , чтобы рассчитать спектр собственного поглощения для прямых (вертикальных) оптических переходов в области E_g^Γ и $E_g^\Gamma + \Delta_{so}$ для всего диапазона составов от $x = 0$ до $x = 1$. Параметр Γ определяет неоднородное уширение спектра и в конечном итоге степень технологической неоднородности состава твердого раствора. Для идеальных случаев величина Γ в соединениях III–V не превышает 3 мэВ [20]. В реальных кристаллах она значительно больше и может служить объективным критерием качества материала.

3. Результаты расчетов и сравнение с экспериментом

Как говорилось во Введении, наиболее достоверные экспериментальные данные получены для твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$ [22], близкого к идеальному. На рис. 3

они сравниваются с результатами проведенных расчетов, подтверждая правомерность предложенных выше модельных представлений. Твердый раствор $Al_xGa_{1-x}As$ обладает прямой структурой энергетических зон только при $x < 0.4$. В области непрямозонных составов при $x > 0.43$ край собственного поглощения определяется непрямыми переходами с участием и без участия фононов в X_1 -минимум зоны проводимости [20], что проявляется в экспериментальных спектрах на рис. 3. Однако даже для непрямозонных составов переходы в Γ -минимум при $\hbar\omega \geq E_0$ хорошо описываются приведенными выше соотношениями.

Дисперсия Γ определяется как составом твердого раствора, т.е. x , так и характерным радиусом локализации R [20,23]. Для свободных носителей и свободных экситонов с большим радиусом локализации величина Γ составляет доли мэВ [20], в то время как для примесных центров в $Ga_xAs_{1-x}P$ она может достигать 10 мэВ для доноров [24,25] и 100 мэВ для изоэлектронных ловушек с малым радиусом локализации [26]. При этом $\Gamma(x) \propto \sqrt{x(1-x)}$ [24] и с учетом уширения $\Gamma(0)$ в бинарных соединениях имеем

$$\Gamma(x) = \Gamma(0) + \gamma\sqrt{x(1-x)}. \quad (12)$$

Эта зависимость сравнивается на рис. 4, а с экспериментальными данными.

Экспериментальные данные для $A(x)$ близки к линейной зависимости, как показано на рис. 4, б. Анализ данных по бинарным соединениям $A^{III}B^V$, представленный на рис. 5, показал, что для них коэффициент A в (8) связан с прямым энергетическим зазором $E_0 = E_g^\Gamma$ эмпирическим соотношением

$$A(E_0) = (1.33 + 1.06E_0) \cdot 10^4, \quad (13)$$

где A имеет размерность $[\text{эВ}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}]$ и E_0 — $[\text{эВ}]$. Эта важная зависимость позволяет определить $A(x)$ для

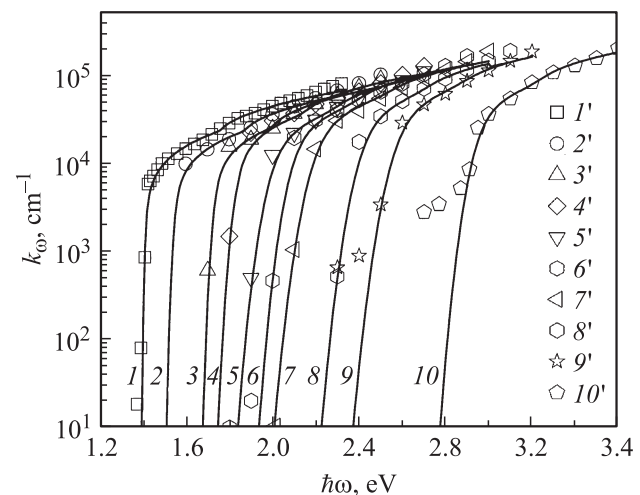


Рис. 3. Край собственного поглощения твердых растворов $Al_xGa_{1-x}As$ при $T = 300$ К. x : 1 — 0, 2 — 0.099, 3 — 0.198, 4 — 0.315, 5 — 0.419, 6 — 0.491, 7 — 0.59, 8 — 0.7, 9 — 0.804, 10 — 1. Сплошные кривые — расчет; экспериментальные данные: $1'$ — [17]; $(2' - 7')$ — [22]; $(8' - 10')$ — [4].

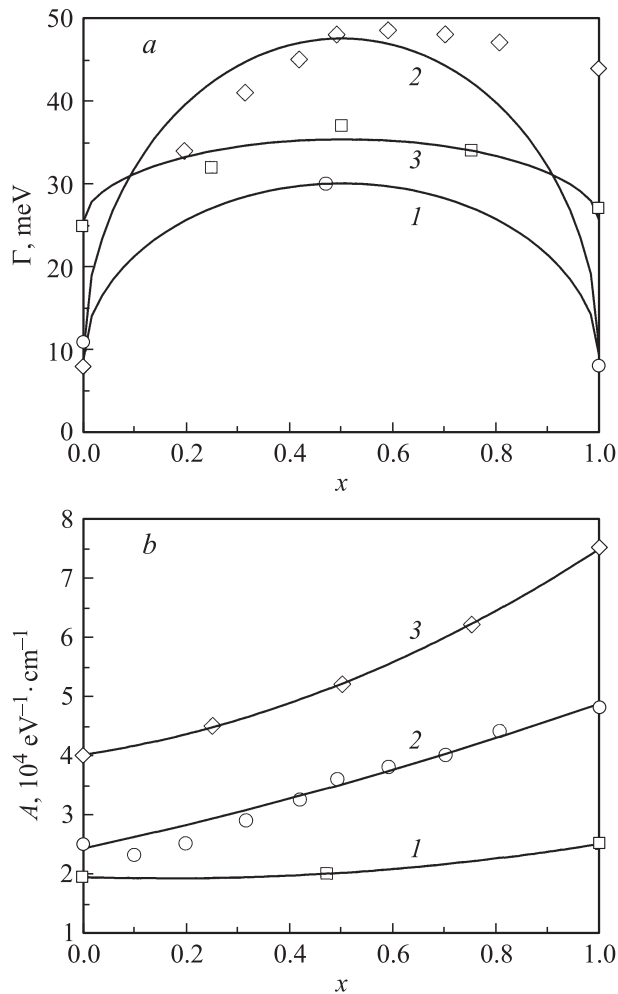


Рис. 4. Зависимость параметров Γ (a) и A (b) от состава твердых растворов: 1 — $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$, 2 — $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, 3 — $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$. a: сплошные кривые — аппроксимация по (12) с $\gamma = 44$ (1), 80 (2), 21 (3).

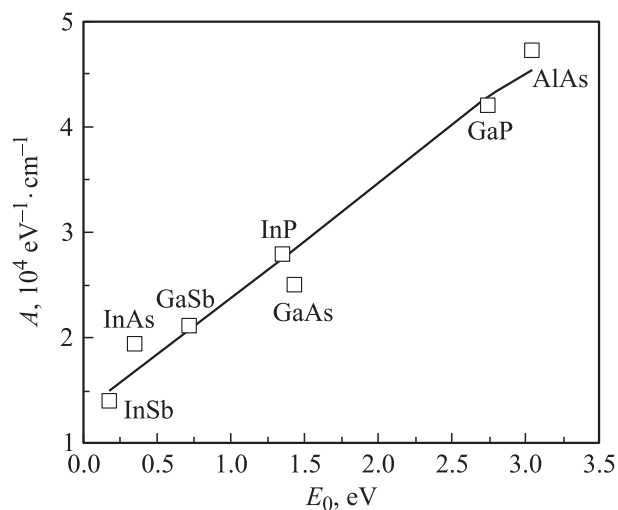


Рис. 5. Зависимость параметра A от величины прямого энергетического зазора $E_0 = E_g^\Gamma$ в бинарных соединениях $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$. Сплошная кривая — аппроксимация (13).

твердых растворов даже в том случае, если отсутствуют достоверные данные для бинарных соединений.

Дееспособность предложенной методики расчета была опробована также на твердом растворе $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$, обладающем прямой структурой энергетических зон во всем диапазоне составов $0 \leq x \leq 1$. Соответствующие результаты приведены на рис. 6. Учтены как переходы (8) вблизи $E_0 = E_g^\Gamma$, так и переходы с участием валентной зоны, отщепленной спин-орбитальным взаимодействием (10). Последние проявляются в виде перегиба при $\hbar\omega = E_0 + \Delta_{so}$ в спектрах на рис. 6. Сравнение с экспериментальными данными было возможно только для состава с $x = 0.47$, изорешеточного с InP , поскольку только для него имеются надежные результаты [4].

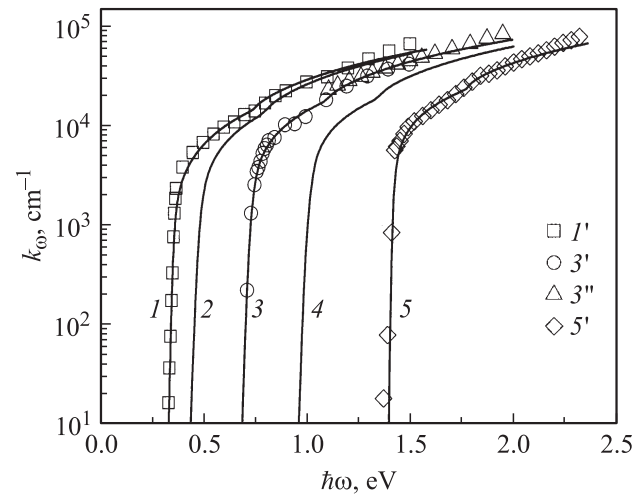


Рис. 6. Край собственного поглощения твердых растворов $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ при $T = 300\text{ K}$. x : 1 — 0, 2 — 0.2, 3 — 0.47, 4 — 0.7, 5 — 1. Сплошные кривые — расчет; экспериментальные данные: 1' — [5]; 3' — [27], 3'' — [28] и 5' — [17].

Отметим характерный факт. Экспериментальные значения $\Gamma(x)$ для $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ меньше, чем для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (рис. 4, a), при этом они существенно превышают рассчитанные для идеальных растворов величины $\Gamma(x)$ [20]. Ковалентные радиусы атомов Al и Ga близки, в то время как несовпадение радиусов In и Ga должно приводить к макроскопическим флуктуациям состава и увеличению $\Gamma(x)$. Наблюдаемая на рис. 4, a противоположная ситуация определяется тем, что экспериментальные данные для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ получены на образцах, выращенных жидкофазной эпитаксией [22], а для $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ — газофазной эпитаксией из металл-органических соединений [27,28], обеспечивающей значительно более высокую технологическую однородность состава. Это указывает, что наблюдаемое уширение $\Gamma(x)$ может служить объективным критерием однородности состава твердого раствора.

На рис. 7 приведены результаты расчетов для востребованных в оптоэлектронике твердых растворов $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$, изорешеточных с GaAs [29], иллюстрирующие возможность применения метода не только

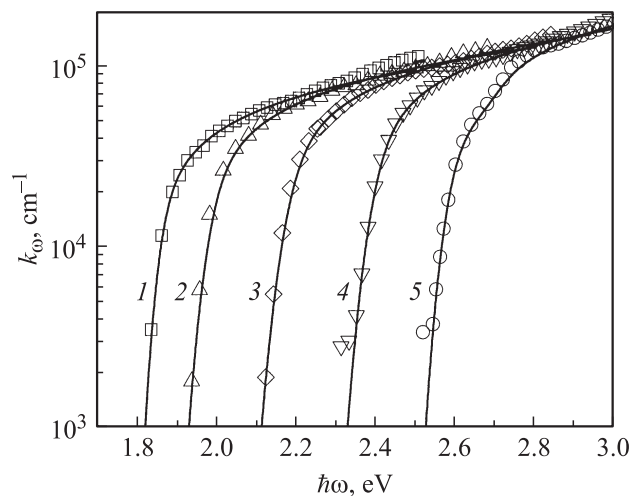


Рис. 7. Край собственного поглощения твердых растворов $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ при $T = 300$ К. x : 1 — 0, 2 — 0.25, 3 — 0.5, 4 — 0.75, 5 — 1. Сплошные кривые — расчет, точки — экспериментальные данные [29].

к трехкомпонентным, но и к четырехкомпонентным твердым растворам. В последнем случае определение $E_0(x, y)$ проводилось по соотношениям, приведенным в [30].

4. Спектры собственной люминесценции

Из полученных данных по краю собственного поглощения легко вычисляются спектры спонтанной люминесценции $\Phi_\omega(\hbar\omega)$ для переходов зона–зона, поскольку они связаны между собой хорошо известным соотношением Ван-Русбрека–Шокли, которое удобно записать в

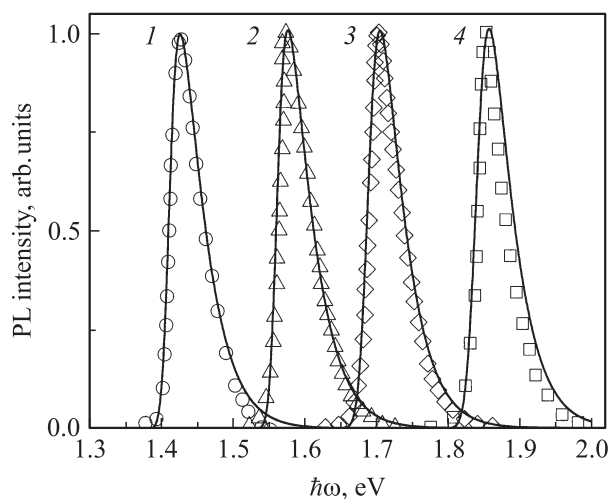


Рис. 8. Спектры фотолуминесценции (PL) при $T = 300$ К твердых растворов $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. x : 1 — 0, 2 — 0.1022, 3 — 0.1953, 4 — 0.3057. Сплошные кривые — расчет, точки — экспериментальные данные [31].

виде

$$\Phi_\omega(\hbar\omega) = B'(\hbar\omega)^2 k_\omega \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (14)$$

где k_B — постоянная Больцмана.

При отсутствии вырождения и $\hbar\omega \gg k_B T$

$$\Phi_\omega(\hbar\omega) = B(\hbar\omega)^2 k_\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega - E_0}{k_B T}\right). \quad (15)$$

Коэффициенты $A(x)$ входят в константы B' и B , с помощью которых по известной методике [2] могут быть определены излучательные времена жизни для межзонных переходов.

В качестве примера рассчитанные по (8), (15) спектры люминесценции сравниваются на рис. 8 с экспериментальными данными [31] для твердого раствора $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Отметим хорошее согласие спектров в длинноволновой области, чего невозможно достичь без учета уширения.

5. Заключение

Сравнение результатов расчетов с опубликованными экспериментальными данными показало дееспособность предложенных представлений для моделирования оптических свойств полупроводниковых твердых растворов вблизи края их фундаментального поглощения, определяемого прямыми межзонными переходами. Развитый метод расчета спектров собственного поглощения содержит минимум подгоночных параметров, что делает его универсальным и удобным для практического применения. Неоднородное уширение необходимо учитывать для описания как края собственного поглощения, так и спектров собственной излучательной рекомбинации. Величина этого уширения в реальных твердых растворах существенно превышает предел, определяемый статистическим беспорядком в идеальном твердом растворе, и, как правило, определяется технологическими неоднородностями состава. На форму спектров поглощения при $\hbar\omega \geq E_0$ заметное влияние оказывает непараболичность зоны проводимости. Ее учет совместно с учетом уширения позволяет по соотношениям (8), (13) рассчитать спектр собственного поглощения твердого раствора в области от прямой ширины запрещенной зоны $E_0 = E_g^\Gamma$ до начала переходов с участием спин-отщепленной валентной зоны, т. е. до $\hbar\omega = E_0 + \Delta_{so}$. Соотношение (10) позволяет учесть эти переходы без введения каких-либо подгоночных параметров.

Полученные результаты применимы не только к твердым растворам полупроводников группы $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, но и к другим прямозонным материалам включая соединения $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$.

Работа выполнялась при финансовой поддержке целевой Федеральной программы „Поддержка научного потенциала высшей школы РФ“, гранты РНП.2.1.2.1716 и 2.1.2.652.

Список литературы

- [1] Ж.И. Алфёров, В.М. Андреев, В.И. Корольков, Е.Л. Портной, Д.Н. Третьяков. ФТП, **2**, 1016; 1545 (1968).
- [2] А.Н. Пихтин. *Оптическая и квантовая электроника* (М., Высш. шк., 2001, 2009).
- [3] H.C. Casey, jr., D.D. Sell, K.W. Wecht. J. Appl. Phys., **46**, 250 (1975).
- [4] S.S. Adachi. *Optical Constants of Crystalline and Amorphous Semiconductors: Numerical Data and Graphical Information* (Kluwer Academic, Boston, 1999).
- [5] *Handbook of Optical Constants of Solids I and II*, ed. by E.D. Palik (Academic Press, San Diego, 1998).
- [6] D.E. Aspnes, A.A. Studna. Phys. Rev. B, **27**, 985 (1983).
- [7] *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, ed. by O. Madelung, M. Schulz, H. Weiss and U. Rössler [*Landolt-Börnstein, New Series, Group III*: v. 17, pt A (Springer, Berlin, 1982); v. 22, pt A (Springer, Berlin, 1987); v. 41, pt B (Springer, Berlin, 2002)].
- [8] S.S. Adachi. J. Appl. Phys., **53**, 5863 (1982).
- [9] A.D. Rakic, M.L. Majewski. J. Appl. Phys., **80**, 5909 (1996).
- [10] J. Zheng, C.-H. Lin, C.H. Kuo. J. Appl. Phys., **82**, 782 (1997).
- [11] F.L. Terry, jr. J. Appl. Phys., **70**, 409 (1991).
- [12] C.C. Kim, J.W. Garland, P.M. Raccah. Phys. Rev. B, **47**, 1876 (1993).
- [13] Y.W. Jung, T.J. Kim, J.J. Yoon, Y.D. Kim, D.E. Aspnes. J. Appl. Phys., **104**, 13 515 (2008).
- [14] J. Bardeen, F.J. Blatt, L.H. Hall. *Photoconductivity conference* (Wiley, N.Y., 1954) p. 36.
- [15] T.S. Moss. *Optical properties of semiconductors* (Butterworths, London, 1959) p. 36.
- [16] P.K. Chakraborty, L.J. Singh, K.P. Ghatak. J. Appl. Phys., **95**, 5311 (2004).
- [17] D.D. Sell, H.C. Casey. J. Appl. Phys., **45**, 800 (1974).
- [18] C. Chezzi, R. Magnanini, A. Parisini, B. Rotelli, L. Tanicone, A. Bosacchi, S. Franchi. Phys. Rev. B, **52**, 1463 (1995).
- [19] Y. Chang, C.H. Grein, S. Sivananthan, M.E. Flatte, V. Nathan, S. Guha. Appl. Phys. Lett., **89**, 62 109 (2006).
- [20] А.Н. Пихтин. ФТП, **11**, 425 (1977).
- [21] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L. Ram-Mohan. J. Appl. Phys., **89**, 5815 (2001).
- [22] D.E. Aspnes, S.M. Kelso, R.A. Logan, R. Bhat. J. Appl. Phys., **60**, 754 (1986).
- [23] Ж.И. Алфёров, Е.Л. Портной, А.А. Рогачев. ФТП, **2**, 1194 (1968).
- [24] В. Берндт, А.А. Копылов, А.Н. Пихтин. ФТП, **11**, 2206 (1977).
- [25] А.А. Копылов, А.Н. Пихтин. ФТП, **15**, 2164 (1981).
- [26] Г.Ф. Глинский, М.В. Лупал, И.И. Парфенова, А.Н. Пихтин. ФТП, **26**, 641 (1992).
- [27] F.R. Vacher, J.S. Blakemore, J.T. Ebner, J.R. Arthur. Phys. Rev. B, **37**, 2551 (1988).
- [28] H. Burkhard, H.W. Dinges, E. Kuphal. J. Appl. Phys., **53**, 655 (1982).
- [29] S. Ozaki, S. Adachi, M. Sato, K. Ohtsuka. J. Appl. Phys., **79**, 439 (1996).
- [30] A.N. Pikhtin, O.L. Lazarenkova. In: *Handbook of Electroluminescent Materials*, ed. by D.R. Vij (Institute of Physics Publishing, Bristol, 2004) p. 282.
- [31] L.H. Robins, J.T. Armstrong, R.B. Marinenko, A.J. Paul, J.G. Pellegrino. J. Appl. Phys., **93**, 3747 (2003).

Редактор Л.В. Шаронова

The intrinsic absorption spectra of semiconductor solid solutions near the direct energy gap

A.N. Pikhtin, H.H. Hegazy

Saint-Petersburg Electrotechnical University,
197376 St.Petersburg, Russia

Abstract A useful method of calculation of the intrinsic absorption edge of semiconductor solid solutions with direct energy gap is presented. The method is based on the fundamental absorption spectra of the binary compounds and takes into account the nonparabolicity of the conduction band. It contains only one additional „adjustable parameter“, which determines the inhomogeneous broadening of spectra. The method is approved on the solid solutions $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ lattice matched to GaAs, and $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ lattice matched to InP and can be applied to other alloys as III–V well as II–IV. The intrinsic luminescence spectra can be calculated from the data presented.