

УДК 621.383.4/5

## Модель показателя преломления эпитаксиальных слоёв InP и InGaAsP

А. В. Никонов, Н. М. Куляхтина, К. О. Болтарь, Н. И. Яковлева

*Проведено исследование показателя преломления бинарных соединений InP и четверных растворов InGaAsP. Проведен анализ критических точек в зоне Бриллюэна для полупроводниковых сплавов группы A<sup>3</sup>B<sup>5</sup> со структурой цинковой обманки. Построена модель показателя преломления на широком диапазоне длин волн.*

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

*Ключевые слова:* лавинные фотоприемники, InGaAsP, InP, гетероэпитаксиальные структуры, показатель преломления, зона Бриллюэна.

### Введение

Четверные гетероэпитаксиальные структуры InGaAsP, выращенные на подложке InP, активно используются в *p-i-n*-фотодиодах для создания нового поколения лавинных фотоприемников оптического диапазона 1,2—1,6 мкм [1, 2]. Данный материал обладает прямозонной структурой, что обеспечивает высокий коэффициент поглощения. Благодаря современным методам эпитаксиального выращивания обеспечивается приемлемая морфология поверхности и высокое структурное совершенство материала с минимальной плотностью дефектов.

Показатель преломления и коэффициент оптического поглощения полупроводниковых структур In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As<sub>y</sub>P<sub>1-y</sub>/InP являются важнейшими оптическими характеристиками при энергиях фотонов вблизи ширины запрещенной зоны, обеспечивающими высокие фотоэлектрические параметры фотоприемников, изготовленных на их основе.

В работе [3] исследованы эмпирические зависимости показателя преломления от длины волны для различных составов структур In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As<sub>y</sub>P<sub>1-y</sub>. Большинство этих зависимостей описывают поведение показателя преломления для энергий, значения которых меньше ширины запрещенной зоны.

Целью данной работы являлось исследование значений показателя преломления бинарных

соединений InP и четверных растворов InGaAsP, которые могут быть использованы для построения модели показателя преломления на широком диапазоне длин волн (в рабочем диапазоне длин волн от 0,5—4,0 мкм).

### Ширина запрещенной зоны InGaAsP/InP

В литературе для четверных соединений InGaAsP используется зависимость ширины запрещенной зоны от составов *x* и *y* при температуре 300 К [4]:

$$E_g = 1,35 + 0,668x - 1,17y + 0,758x^2 + 0,18y^2 - 0,069xy - 0,332x^2y + 0,03xy^2$$

Особый интерес представляют соединения, кристаллические решетки которых согласованы с оптически прозрачной подложкой InP. Для In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As<sub>y</sub>P<sub>1-y</sub> соотношение между составами эпитаксиальных слоёв наиболее часто определяется формулой:

$$x \approx \frac{0,1894y}{0,4184 - 0,013y}, \quad 0 \leq y \leq 1.$$

При этом ширина запрещенной зоны зависит только от состава *y* (рис. 1):

$$E_g = 1,35 - 0,72y + 0,12y^2.$$

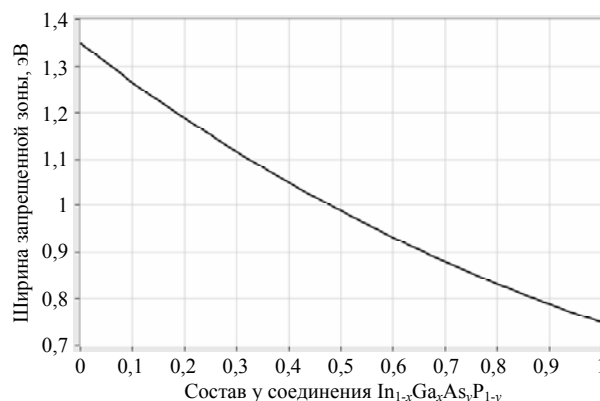


Рис. 1. Зависимость ширины запрещенной зоны от состава *y* эпитаксиального слоя InGaAsP на подложке InP (*T* = 300 К)

Никонов Антон Викторович, инженер<sup>1</sup>, аспирант<sup>2</sup>.  
 Куляхтина Надежда Михайловна, практикант<sup>1</sup>, студент<sup>2</sup>.  
 Болтарь Константин Олегович, начальник НТК<sup>1</sup>, профессор<sup>2</sup>.  
 Яковлева Наталья Ивановна, зам. начальника НИЦ<sup>1</sup>.  
<sup>1</sup>ОАО «НПО «Орион».  
 Россия, 111396, Москва, шоссе Энтузиастов, 46/2.  
 Тел. 8 (499) 374-81-30. E-mail: orion@orion-ir.ru  
<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет).  
 Россия, 141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.

Статья поступила в редакцию 29 сентября 2014 г.

© Никонов А. В., Куляхтина Н. М., Болтарь К. О., Яковлева Н. И., 2015

### Модель показателя преломления

Показатель преломления для энергий, меньших ширины запрещенной зоны, описывается с помощью аналитических функций, которые представляют собой модифицированные соотношения Селлмейера:

$$n^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - C},$$

где коэффициенты Селлмейера  $A$ ,  $B$  и  $C$  зависят от состава исследуемых материалов [5]. Моделирование зависимости ограничивается длиной волны  $\lambda_g$ , соответствующей ширине запрещенной зоны  $E_g$  (рис. 2). Модифицированные соотношения Селлмейера демонстрируют хороший результат для полного диапазона значений составов As и Ga при энергиях фотонов ниже ширины запрещенной зоны. При этом они не выполняются при энергиях фотонов, превышающих ширину запрещенной зоны, так как появляется вероятность переходов через L- и X-точки в зоне Бриллюэна, и вклад  $\Gamma$ -переходов в значение показателя преломления уменьшается (рис. 3).

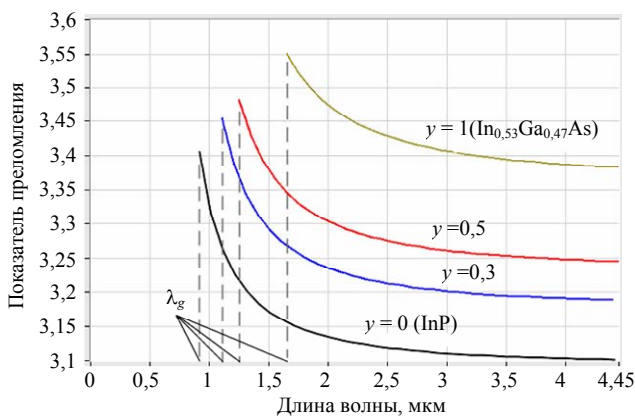


Рис. 2. Модель показателя преломления, основанная на модифицированных соотношениях Селлмейера

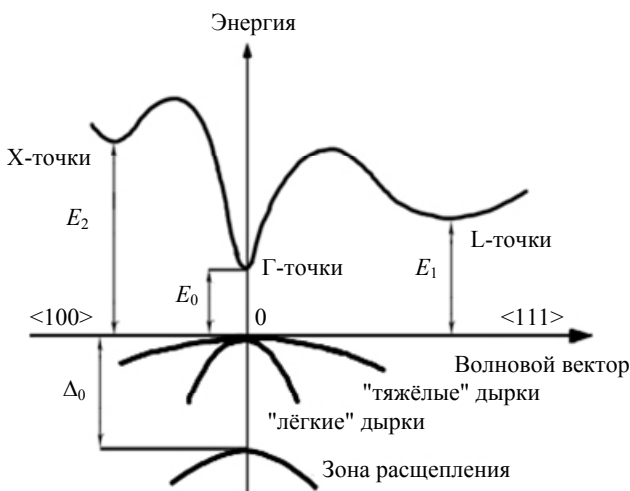


Рис. 3. Энергетическая диаграмма переходов в зоне Бриллюэна для  $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$

Разработанная модель базируется на теоретическом расчете вкладов критических переходов внутри зоны Бриллюэна полупроводниковых сплавов группы  $A^3B^5$  со структурой цинковой обманки в действительную и мнимую части комплексной диэлектрической постоянной:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega).$$

Действительная и мнимая части диэлектрической функции связаны соотношениями Крамерса-Кронига, из которых получены теоретические зависимости показателя преломления для исследуемых в данной работе фосфида индия и четверного соединения  $InGaAsP$ . Комплексный показатель преломления характеризуется зависимостью:

$$n^*(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)},$$

где  $n(\omega)$  — действительная часть показателя преломления,  $k(\omega)$  — коэффициент экстинкции. Оптические параметры  $n(\omega)$  и  $k(\omega)$  могут быть измерены экспериментально. Связь этих параметров с диэлектрической функцией описывается как:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{(\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2)^{1/2} + \varepsilon_1(\omega)}{2}},$$

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{(\varepsilon_1(\omega)^2 + \varepsilon_2(\omega)^2)^{1/2} - \varepsilon_1(\omega)}{2}}.$$

Из значений энергий бинарных соединений  $InP$ ,  $InAs$ ,  $GaP$ ,  $GaAs$  [6] с использованием закона интерполяции Вегарда [7] получены зависимости значений энергий в материале  $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$  для составов  $0 \leq x \leq 1$ ,  $0 \leq y \leq 1$ , соответствующих указанным переходам, где:  $E_0$  — энергия, соответствующая ширине запрещенной зоны;  $E_1$ ;  $E_2$  — значения энергии, соответствующие L- и X-переходам. Вычисления учитывают спин-орбитальное взаимодействие, которое характеризует расщепление валентной зоны и зоны проводимости на подуровни. Соответствующие таким подуровням оптические переходы зависят также от энергий расщепления  $\Delta_0$ ,  $\Delta_1$ .

Мнимую часть диэлектрической постоянной  $\varepsilon_2$  можно определить из фундаментальных соотношений, описывающих зонную диаграмму в материале  $InGaAsP$ :

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

где  $|e \cdot M_{cv}|^2$  — квадрат матричного элемента перехода из валентной зоны в зону проводимости. Показатель преломления связан с диэлектрической постоянной соотношениями Крамерса-Кронига.

Таким образом, оценка вклада в показатель преломления прямых Г-переходов составляет:

$$n_0^2 = \frac{A}{E_0^{1,5}} \left( f(\varphi_{00}) + \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{E_0}{E_0 + \Delta_0} \right)^{1,5} \cdot f(\varphi_{01}) \right),$$

где учитывается функция, зависящая от безразмерной величины энергии:

$$f(\varphi) = \frac{1}{\varphi^2} \left( 2 - (1 + \varphi)^{1/2} - (1 - \varphi)^{1/2} H(1 - \varphi) \right),$$

$$\varphi_{00} = \frac{E}{E_0}, \quad \varphi_{01} = \frac{E}{E_0 + \Delta_0};$$

а также силовой параметр  $E_0$  и  $E_0 + \Delta_0$  переходов  $A$ . Нами выведена линейная зависимость силового параметра от состава  $As$ , находящаяся в согласовании с экспериментальными исследованиями [8]:

$$A(y) = 5,4 - 4,2y.$$

$H(1 - \varphi)$  является функцией Хевисайда.

Переходы через уровни энергии  $E_1$  и  $E_1 + \Delta_1$  осуществляются в L-точках зоны Бриллюэна (направление волнового вектора  $\langle 111 \rangle$ ) и вносят следующий вклад в показатель преломления:

$$n_1^2 = \left( -\frac{B_1}{\varphi_{10}} \cdot \ln(1 - \varphi_{10}^2) - \frac{B_2}{\varphi_{11}} \cdot \ln(1 - \varphi_{11}^2) \right).$$

Здесь:

$$\varphi_{10} = \frac{E}{E_1}, \quad \varphi_{11} = \frac{E}{E_1 + \Delta_1};$$

$B_1$  и  $B_2$  — силовые параметры переходов  $E_1$  и  $E_1 + \Delta_1$ , интерполированные по всему диапазону составов у материала  $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}/InP$  в соответствии с экспериментальными исследованиями [8]:

$$B_1(y) = 4,91 - 3,85y + 2,78y^2,$$

$$B_2(y) = 0,09 + 2,65y - 1,26y^2.$$

Переходы через уровни энергии  $E_2$  происходят в X-точках зоны Бриллюэна в направлении  $\langle 100 \rangle$  волнового вектора. Вклад таких переходов в показатель преломления является значительно меньшим по сравнению с влиянием Г-переходов. Как показал расчёт, влияние спин-орбитального взаимодействия на показатель преломления является незначительным, и в модели показателя преломления расщепление на подуровни для X-переходов не учитывается:

$$n_2^2 = \frac{C(1 - \varphi_2^2)}{((1 - \varphi_2^2)^2 + \varphi_2^2 \gamma^2)},$$

где  $\varphi_2 = \frac{E}{E_2}$ ;

$C$  и  $\gamma$  — параметры переходов  $E_2$ , квадратично зависящие от состава и согласованные с экспериментальными данными [8]:

$$C(y) = 1,30 + 3,70y - 2,10y^2,$$

$$\gamma(y) = 0,093 + 0,256y - 0,124y^2.$$

Теоретические зависимости показателя преломления учитывают значения энергии фотонов во всем энергетическом спектре, в том числе на значениях энергии, превышающих ширину запрещенной зоны.

Проведено моделирование распределения показателя преломления фосфида индия от длины волны (рис. 4), которое подтвердило состоятельность и хорошее соответствие разработанной модели и экспериментальных данных, полученных в ранних работах [9].

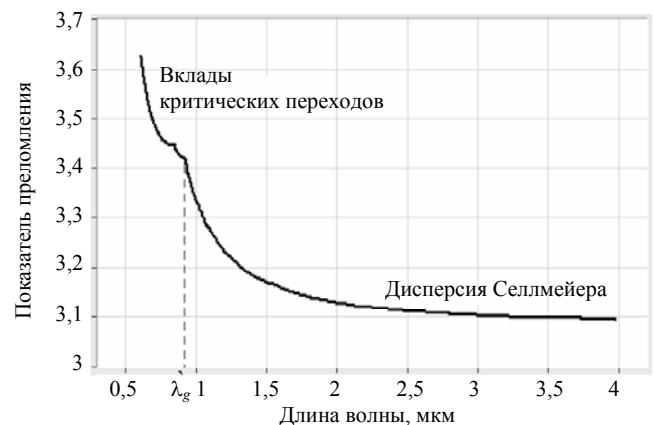


Рис. 4. Распределение показателя преломления InP по длине волны, учитывающее вклады критических переходов в зоне Бриллюэна

Теоретическая модель показателя преломления в совокупности с моделью коэффициента поглощения и матричным методом расчёта параметров многослойных гетероструктур [10] будут использованы для расчетов спектров пропускания и отражения многослойных гетероэпитаксиальных структур твёрдых растворов InGaAsP/InP, что позволит в экспресс-режиме определять характеристики таких многослойных структур, включающие количество, состав, толщины буферных, барьерных и рабочих фоточувствительных эпитаксиальных слоёв.

## Заклучение

Предложен метод вычисления показателя преломления для двойных соединений группы  $A^3B^5$  со структурой цинковой обманки на примере фосфида индия и четверных соединений InGaAsP для энергий выше и ниже края фундаментального поглощения. Аналитическая модель учитывает прямые межзонные переходы и применима для расчета оптических констант с учётом разных факторов (температурных зависимостей, степени легирования). Проведенные исследования являются перспективными для моделирования показателя преломления материала InGaAsP/InP различных составов в диапазоне длин волн 0,5—4,0 мкм и создания инструмента контроля оптических характеристик многослойных гетероэпитаксиальных структур, применяемых в фотоприемниках нового поколения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Филачев А. М., Таубкин И. И., Тришенков М. А. Современное состояние и магистральные направления развития твердотельной фотоэлектроники. — М.: Физматкнига, 2010.
2. Яковлева Н. И., Болтарь К. О., Седнев М. В. // Успехи прикладной физики. 2014. Т. 2. № 4. С. 374.
3. Fiedler F., Schlachetski A. // Solid-State Electronics. 1987. V. 30. No. 1. P. 73.
4. Nahory R. E., Pollack M. A., Johnson W. D., et al. // Appl. Phys. Lett. 1978. V. 33. No. 7. P. 659.
5. Adachi S. // J. Appl. Phys. 1982. V. 53. No. 12. P. 8775.
6. Adachi S. // J. Appl. Phys. 1989. V. 66. No. 12. P. 6030.
7. Denton A. R., Ashcroft N. W. // Phys. Rev. A. 1991. V. 43. No. 6. P. 3161.
8. Kelso S. M., et al. // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. No. 12. P. 6669.
9. Reid B., Maciejko R., Champagne A. // Can. J. Phys. 1993. V. 71. No. 410. P. 410.
10. Болтарь К. О., Яковлева Н. И., Никонов А. В. // Прикладная физика. 2011. № 5. С. 100.

## Refractive index of InP and InGaAsP epitaxial layers

A. V. Nikonov<sup>1,2</sup>, N. M. Kulyahtina<sup>1,2</sup>, K. O. Boltar<sup>1,2</sup>, and N. I. Iakovleva<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Orion R&P Association Inc.  
46/2 Enthusiasts highway, Moscow, 111123, Russia  
E-mail: orion@orion-ir.ru

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

Received September 29, 2014

*Refractive index model was developed and plotted in dependence of InP and InGaAsP parameters in 0.5—4.0 μm wavelength range. Analysis of transitions at critical points in the Brillouin zone for crystals with the zinc-blende arrangement of III-V compounds was made.*

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

*Keywords:* avalanche photodiodes, InGaAsP, InP, heteroepitaxial structures, refractive index, Brillouin zone.

## REFERENCES

1. A. M. Filachev, I. I. Taubkin, and M. A. Trishenkov, *The Current Status and Main-Line Trackage for Development of Photoelectronics* (Fizmatkniга, Moscow, 2010) [in Russian].
2. N. I. Yakovleva, K. O. Boltar, M. V. Sednev, *Uspekhi Prikladnoy Fiziki*, Vol. 2. No. 4, 374 (2014).
3. F. Fiedler and A. Schlachetski, *Solid-State Electronics* **30** (1), 73 (1987).
4. R. E. Nahory, M. A. Pollack, W. D. Johnson, et al., *Appl. Phys. Lett.* **33**, 659. (1978)
5. S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **53**, 8775 (1982).
6. S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **66**, 6030 (1989).
7. A. R. Denton and N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. A.* **43**, 3161.(1991)
8. S. M. Kelso, et al., *Phys. Rev. B.* **26**, 6669 (1982).
9. B. Reid, R. Maciejko, and A. Champagne, *Can. J. Phys.* **71**, 410 (1993).
10. K. O. Boltar, N. I. Iakovleva, and A. V. Nikonov, *Prikladnaya Fizika*, No. 5, 100 (2011).