

УДК 621.383.4/5

Исследование влияния зонной структуры на диэлектрическую проницаемость эпитаксиальных слоев соединений $A^{III}B^V$

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

Проведен анализ прямых энергетических переходов в зоне Бриллюэна соединений группы $A^{III}B^V$, четверных соединений InGaAsP. Построена модель диэлектрической проницаемости с учетом влияния Γ -, L-, X-переходов 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, гетероэпитаксиальные структуры, диэлектрическая проницаемость, зона Бриллюэна.

Введение

Матричные фотоприемники на основе четверного соединения InGaAsP являются отличным выбором для систем формирования изображений в коротковолновой области ИК-диапазона вследствие высокой квантовой эффективности и зрелости технологии их изготовления [1, 2]. Благодаря прямой структуре энергетических зон данного материала, здесь обеспечиваются высокий коэффициент поглощения и высокое структурное совершенство с низкой плотностью дефектов.

Перед разработчиками фотоприемных устройств остро стоит задача контроля и трактовки характеристик ГЭС InGaAsP/InP вблизи края фундаментального поглощения: диэлектрической проницаемости, коэффициента поглощения, показателя преломления. Рассматриваемые характеристики изучались в ранних работах [3, 4], но проведенные исследования характеризуют оптические свойства эпитаксиальных слоев на довольно ограниченном спектральном диапазоне излучения.

Целью данной работы было моделирование оптических характеристик слоев соединений $A^{III}B^V$, в частности, четверных соединений InGaAsP на широком диапазоне длин волн (0,5—4,0 мкм).

Никонов Антон Викторович, инженер 2 категории НИЦ¹.
Куляхтина Надежда Михайловна, практикант¹, студент².
Яковлева Наталья Ивановна, зам. начальника НИЦ¹.
Болтарь Константин Олегович, начальник НТК¹, профессор².
¹АО «НПО «Орион».
 Россия, 111538, Москва, ул. Косинская, 9.
 Тел. 8 (499) 374-81-30. E-mail: orion@orion-ir.ru
²Московский физико-технический институт (государственный университет).
 Россия, 141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.

Статья поступила в редакцию 21 августа 2015 г.

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

Анализ энергетических переходов в зоне Бриллюэна материалов со структурой цинковой обманки

Четверное соединение InGaAsP, как и большинство важнейших полупроводников, имеет кристаллическую структуру типа сфалерита (цинковой обманки). Особенностью такой структуры является наличие точек высокой симметрии (критических точек) в зоне Бриллюэна. Ключевые критические точки позиционируются в центре зоны (Γ -точки), а также на пересечении осей $\langle 111 \rangle$ (L-точки) и $\langle 100 \rangle$ (X-точки) с краем зоны.

Валентная зона в кристаллах со структурой цинковой обманки состоит из четырех подзон, двукратно вырожденных в центре зоны при волновом векторе $k = 0$, которые формируют верхний край валентной зоны (см. рис. 1). Дно зоны проводимости находится либо на осях $\langle 111 \rangle$ (L-точки), либо на осях $\langle 100 \rangle$ (X-точки), либо при $k = 0$ (Γ -точки). Так как $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ является прямозонным полупроводниковым материалом, то наименьший уровень зоны проводимости рассчитывается при $k = 0$.

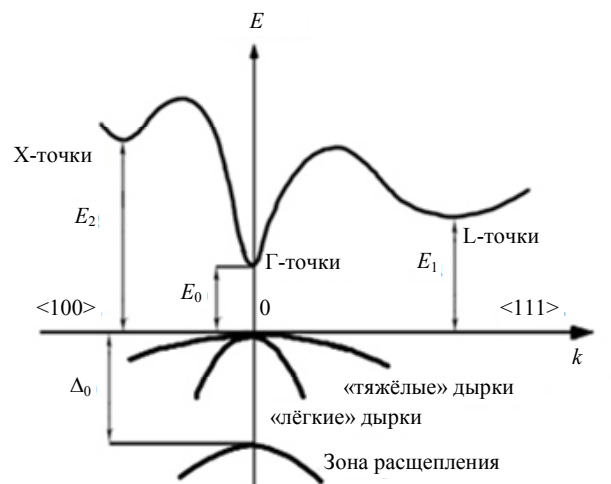


Рис. 1. Энергетическая диаграмма переходов в зоне Бриллюэна для $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$

При росте энергии появляется вероятность переходов через L- и X-точки, и вклад Г-переходов в значение диэлектрической проницаемости уменьшается. Значения энергий E_0 , E_1 , E_2 определяются особенностями кристаллической структуры материалов, в частности, постоянной решетки.

Спин-орбитальное взаимодействие приводит к отщеплению одной подзоны в валентной зоне. Две оставшиеся подзоны у потолка валентной зоны можно аппроксимировать параболическими зависимостями с различной кривизной.

Методика расчета диэлектрической проницаемости четверного соединения InGaAsP

Для расчёта оптических и электрофизических параметров четверного соединения InGaAsP применим закон интерполяции Вегарда, а именно, аппроксимированное эмпирическое правило, согласно которому свойства кристаллической решетки сплава линейно зависят от концентрации отдельных элементов сплава [5]. В соответствии с законом Вегарда, установлена связь между параметрами $Q(x, y)$ четверного соединения $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ и соответствующими параметрами бинарных составляющих InGaAsP: InP, GaP, GaAs, InAs:

$$Q(x, y) = (1-x)yB_{\text{InAs}} + (1-x)(1-y)B_{\text{InP}} + xyB_{\text{GaAs}} + x(1-y)B_{\text{GaP}}.$$

Данный закон применим также для установления связи между параметрами InGaAsP и тройных соединений InGaP, InGaAs, InAsP, GaAsP. В связи с тем, что в настоящее время имеется недостаточно данных о свойствах и характеристиках тройных соединений, использование такой модели затруднено, и в проведенном далее исследовании для вычисления характеристик четверного раствора InGaAsP применялись рассчитанные значения двойных соединений GaAs, GaP, InP, InAs [6].

Соотношения Крамерса-Кронига являются удобным инструментом для исследования оптических констант полупроводниковых материалов [7]. Они описывают связь между действительной и

мнимой частями комплексной диэлектрической постоянной:

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

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega'$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega'.$$

Мнимая часть диэлектрической постоянной ε_2 рассчитывается из фундаментальных соотношений, описывающих зонную диаграмму в материале InGaAsP:

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

где $|e \cdot M_{cv}|^2$ — квадрат матричного элемента перехода из валентной зоны в зону проводимости.

В проведенном исследовании модель диэлектрической проницаемости четверного соединения InGaAsP включает в себя вклады переходов в критических точках зоны Бриллюэна:

$$\varepsilon = \varepsilon_\Gamma + \varepsilon_L + \varepsilon_X,$$

где ε — полная диэлектрическая проницаемость, ε_Γ , ε_L , ε_X — соответствующие вклады в диэлектрическую проницаемость от Г-, L- и X-переходов.

В соответствии с энергетической диаграммой переходов в зоне Бриллюэна, наименьшие прямые переходы происходят при значении волнового вектора $k = 0$. Значение энергии таких переходов составляет E_0 . Спин-орбитальное взаимодействие расщепляет валентную зону на два подуровня, при этом энергия расщепления равняется Δ_0 . Критические точки данных Г-переходов являются трёхмерными точками M_0 -типа (зонные уровни в окрестностях точек имеют параболический вид). Используя соотношения Крамерса-Кронига, получено значение вклада Г-переходов в диэлектрическую проницаемость:

$$\varepsilon_{\Gamma 1}(\omega) = \frac{A}{E_0^{1.5}} \left(f(\varphi_{00}) + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{E_0}{E_0 + \Delta_0} \right)^{1.5} \cdot f(\varphi_{01}) \right),$$

$$\varepsilon_{\Gamma 2}(\omega) = \frac{A}{(\hbar\omega)^2} \left(H(\varphi_{00} - 1) \sqrt{\hbar\omega - E_0} + \frac{1}{2} \cdot H(\varphi_{01} - 1) \sqrt{\hbar\omega - E_0 - \Delta_0} \right),$$

где $f(\varphi)$ — функция, зависящая от безразмерной величины энергии:

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

$H(\varphi)$ — функция Хевисайда:

$$H(\varphi) = \begin{cases} 1, & \varphi \geq 0 \\ 0, & \varphi < 0 \end{cases},$$

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

Параметр A является силовым параметром переходов E_0 и $E_0 + \Delta_0$, для которого нами выведена зависимость от составов x и y соединения $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$, используя закон интерполяции Вегарда (см. рис. 2):

$$A(x, y) = 6,57 + 7,19x - 5,96y - 4,35xy.$$

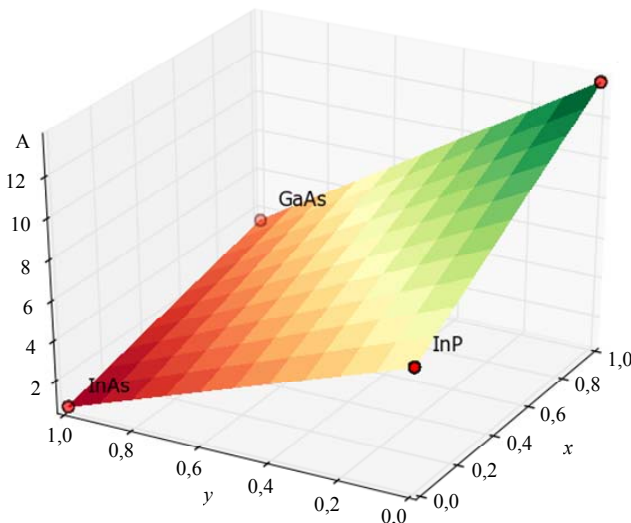


Рис. 2. Зависимость силового параметра A от составов материала x и y

Данная модель находится в согласии с экспериментальными исследованиями [8] и показывает, что при увеличении мольных долей Ga и P в полупроводниковом соединении $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ увеличивается степень влияния вкладов Γ -переходов на значение диэлектрической проницаемости материала.

Критические точки L-переходов относятся к трёхмерному M_1 -типу. Так как продольные эффективные массы трёхмерных критических точек M_1 -типа значительно больше, чем поперечные эффективные массы, влиянием поперечного направления можно пренебречь, и для данных точек в исследовании используется приближение двухмерных точек M_0 -типа. С учётом данного фактора получаем суммарный вклад L-переходов в значение составляющих диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon_{L2}(\omega) = \frac{\pi B_1}{\varphi_{10}^2} H(\varphi_{10} - 1) + \frac{\pi B_2}{\varphi_{11}^2} H(\varphi_{11} - 1),$$

$$\varepsilon_{L1}(\omega) = -\frac{B_1}{\varphi_{10}^2} \ln(1 - \varphi_{10}^2) - \frac{B_2}{\varphi_{11}^2} \ln(1 - \varphi_{11}^2),$$

где $\varphi_{10} = E/E_1$, $\varphi_{11} = E/(E_1 + \Delta_1)$ — безразмерные величины энергии; $H(\varphi)$ — функция Хевисайда; B_1, B_2 — силовые параметры, зависящие от кристаллических свойств материала, для которых в исследовании рассчитаны интерполированные значения на полных диапазонах составов материала InGaAsP.

Точки X-типа не являются локализованными критическими точками, и зависимость их вкладов в диэлектрическую проницаемость нельзя описать моделями M_0 и M_1 -точек в спектральном диапазоне энергий, близких к энергии E_2 . Наилучшее приближение описывается с помощью модели затухающего гармонического осциллятора:

$$\varepsilon_{X1}(\omega) = \frac{C(1 - \varphi_2^2)}{(1 - \varphi_2^2)^2 + (\varphi_2\gamma)^2},$$

$$\varepsilon_{X2}(\omega) = \frac{C\varphi_2\gamma}{(1 - \varphi_2^2)^2 + (\varphi_2\gamma)^2},$$

где C — силовой параметр переходов, γ — параметр уширения, $\varphi_2 = E/E_2$. Для различных составов материала InGaAsP нами проведен расчет и вычислены значения параметров C и γ , которые находятся в хорошем согласовании с экспериментальными данными [8].

Далее проведено моделирование зависимости диэлектрической проницаемости материала $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ от длины волны и энергии излучения при различных составах материала x и y . На рис. 3 показано сравнение зависимостей реальной составляющей диэлектрической проницаемости от длины волны для материалов InP и GaAs. Подложки из данных материалов наиболее перспективны в технологии изготовления гетеропи-таксиальных структур на основе соединений группы $A^{III}B^V$. Полученные зависимости показывают свою состоятельность при сравнении с экспериментальными результатами, полученными сторонними исследователями [4, 8], что говорит о качестве и эффективности разработанной модели.

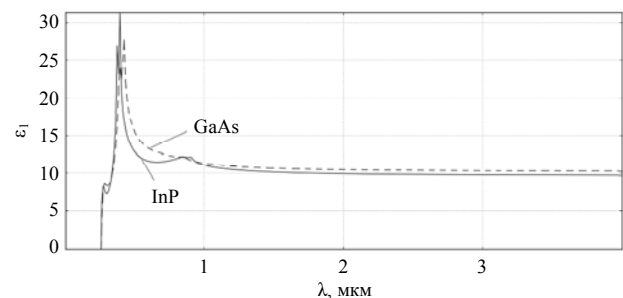


Рис. 3. Сравнение зависимостей реальной составляющей диэлектрической проницаемости ε_1 от длины волны λ для материалов InP и GaAs

На рис. 4 представлена зависимость суммарной реальной составляющей диэлектрической проницаемости от длины волны для материала $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$. Гетероэпитаксиальные структуры $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{InP}$ находят активное применение в технологии изготовления лавинных фотодиодов для формирователей сигналов трехмерного изображения [9, 10].

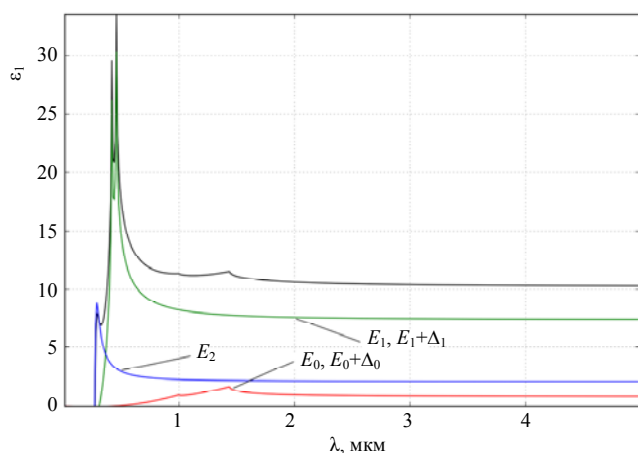


Рис. 4. Зависимость диэлектрической проницаемости ϵ_1 от длины волны λ для материала $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$

Наибольшее значение диэлектрической проницаемости достигается при длине волны излучения 0,5 мкм и обуславливается значениями оптических переходов E_1 и $E_1+\Delta_1$. При этом реальная составляющая диэлектрической проницаемости ϵ_1 принимает стабильные значения на длинах волн более 2 мкм, что говорит о постоянстве показателя преломления исследуемого материала.

Диэлектрическая проницаемость — важный параметр полупроводниковых соединений, отвечающий за понимание фундаментальных физических и оптических характеристик материала. Разработанная модель диэлектрической проницаемости имеет существенную перспективу для расчетов показателя преломления, коэффициента экстинкции, коэффициента поглощения эпитакси-

альных слоев InGaAsP , входящих в состав сложных ГЭС $\text{InGaAsP}/\text{InP}$.

Заключение

Проведен анализ энергетических переходов в зоне Бриллюэна четверного соединения InGaAsP . Разработана и построена модель зависимости диэлектрической проницаемости материала $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ различных составов от длины волны и энергии излучения для энергий выше и ниже края фундаментального поглощения. Модель является перспективной для моделирования оптических характеристик (показателя преломления, коэффициента поглощения) эпитаксиальных слоев, входящих в состав сложных гетероэпитаксиальных структур $\text{InGaAsP}/\text{InP}$ в диапазоне длин волн 0,5—4,0 мкм.

Работа выполнена по гранту Президента Российской Федерации НШ-2787.2014.9.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бурлаков И. Д., Дирочка А. И., Корнеева М. Д. и др. // Успехи прикладной физики. 2014. Т. 2. № 5. С. 509.
2. Корнеева М. Д., Пономаренко В. П., Филачев А. М. // Прикладная физика. 2011. № 2. С. 47.
3. Fiedler F., Schlachezki A. // Solid-State Electronics. 1987. V. 30. No. 1. P. 73.
4. Adachi S. // J. Appl. Phys. 1982. V. 53. No. 12. P. 8775.
5. Denton A. R., Ashcroft N. W. // Phys. Rev. A. 1991. No. 43. P. 3161.
6. Adachi S. Physical properties of III-V semiconductor compounds: InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP. — John Wiley & Sons, 1992.
7. Рогальский А. Инфракрасные детекторы: пер. с англ. / Под ред. А. В. Войцеховского. — Новосибирск: Наука, 2003.
8. Kelso S. M., Aspnes D. E., Pollack M. A., et al. // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. No. 12. P. 6669.
9. Яковлева Н. И., Болтарь К. О., Седнев М. В. // Успехи прикладной физики. 2014. Т. 2. № 4. С. 374.
10. Андреев Д. С., Гришина Т. Н., Залетаев Н. Б. и др. // Прикладная физика. 2012. № 4. С. 86.

Model of $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ epitaxial layers dielectric function depending on electronic energy-band structure

A. V. Nikonov^{1,2}, N. M. Kulyahtina^{1,2}, N. I. Iakovleva¹, and K. O. Boltar^{1,2}

¹Orion R&P Association, Inc.
9 Kosinskaya str., Moscow, 111538, Russia
E-mail: orion@orion-ir.ru

²Moscow Institute of Physics and Technology
9 Institute al., Dolgoprudny, Moscow Region, 141700, Russia

Received August 21, 2015

Analysis of critical points in the Brillouin zone of the $A^{III}B^V$ crystals was made. Direct transitions at Γ -, L -, X -points make the strong impact on a dielectric function. The model of InGaAsP epitaxial layers dielectric function at 0.5—4.0 μm spectral range was developed.

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

Keywords: avalanche photodiodes, InGaAsP, heteroepitaxial structures, dielectric function, Brillouin zone.

REFERENCES

1. I. D. Burlakov, A. I. DFirochka, M. D. Korneeva, et al., *Uspekhi Prikladnoi Fiziki* **2**, 509 (2014).
2. M. D. Korneeva, V. P. Ponomarenko, and A.M. Filachev, *Prikladnaya Fizika*, No. 2, 47 (2011).
3. F. Fiedler and A. Schlachetski, *Solid-State Electronics* **30** (1), 73 (1987).
4. S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **53**, 8775 (1982).
5. A. R. Denton and N. W. Ashcroft, *Phys. Rev. A* **43**, 3161 (1991).
6. S. Adachi, *Physical properties of III-V semiconductor compounds: InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP* (John Wiley & Sons, 1992).
7. A. Rogalski, *Infrared Detectors* (Novosibirsk, Nauka, 2003) [in Russian].
8. S. M. Kelso, D. E. Aspnes, M. A. Pollack, et al., *Phys. Rev. B.* **26**, 6669 (1982).
9. N. I. Iakovleva, K. O. Boltar, and M. V. Sednev, *Uspekhi Prikladnoi Fiziki* **2**, 374 (2014).
10. D. S. Andreev, T. N. Grishuna, N. B. Zaletaev, et al., *Prikladnaya Fizika*, No. 4, 86 (2012).

* * *