

УДК 621

DOI: 10.51368/1996-0948-2023-5-61-67

EDN: HZMUZQ

PACS: 42.79.Pw, 85.60.Gz,

85.60.Dw, 07.57.Kp

**Аналитическая модель коэффициента поглощения антимонида индия***В. С. Ковшов*

Проведен анализ существующих аналитических моделей расчета коэффициента поглощения. Выделены их преимущества и недостатки. Разработана новая аналитическая модель коэффициента поглощения антимонида индия, учитывающая эффект Бурштейна-Мосса, правило Урбаха и температурную зависимость межзонного поглощения. Проведен сравнительный анализ экспериментальных спектров пропускания и поглощения InSb с результатами расчета.

Ключевые слова: InSb, коэффициент поглощения, правило Урбаха, эффект Бурштейна-Мосса.

Введение

Одним из основных методов характеристики и исследования полупроводниковых структур является анализ их спектральных характеристик. В зависимости от архитектуры структуры, условий измерений, материалов, используемых в структуре, свойств подложки и других факторов, вид спектра может существенно меняться. Оценка оптических характеристик проводится с применением моделей расчета показателя преломления и коэффициента поглощения полупроводниковых материалов. Особенности этих характеристик существенным образом влияют на выходные фотоэлектрические параметры ИК фотодетекторов, такие как квантовая эффективность, спектральная характеристика чувствительности, удельная обнаружительная способ-

ность и другие. Поэтому подробное исследование особенностей оптических характеристик позволяет получить более полное представление об этих свойствах и с повышенной точностью оценить значения параметров оптико-электронных систем.

Анализ моделей поглощения

В литературе существует несколько различных аналитических моделей для расчета показателя преломления и коэффициента поглощения. Ниже приведен детальный анализ некоторых из них.

Модель Адаши (Adachi Model)

Данная модель [1] описывает расчет действительной и комплексной частей диэлектрической функции полупроводников, основанная на соотношении Крамерса-Кронига и учитывающая особенности зонной структуры материала. В модели рассматриваются критические точки, которые соответствуют разрешенным прямым межзонным переходам (E_0 , $E_0 + \Delta_0$, E_1 , $E_1 + \Delta_1$ и E_2). Модель Адаши является одной из широко распространенных моделей расчета показателя преломления и коэффициента экстинкции, однако имеет ряд недостатков. Во-первых, модель рассматри-

Ковшов Владимир Сергеевич^{1,2}, инженер.

E-mail: kovshov@phystech.edu

E-mail: orion@orion-ir.ru

¹ АО «НПО «Орион».

Россия, 111538, Москва, ул. Косинская, 9.

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет).

Россия, 141701, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.

Статья поступила в редакцию 30.08.2023

Принята к публикации 16.09.2023

© Ковшов В. С., 2023

вает условие комнатной температуры, что делает ее непригодной для исследования спектров при низких температурах (например, при 77 К). Во-вторых, модель не учитывает влияние концентрации примесей, увеличение которой может привести к сдвигу края поглощения в коротковолновую область (эффект Бурштейна-Мосса), а также не учитывает наличие «хвостов» плотности состояний, приводящее к появлению так называемого «хвоста Урбаха».

Модель Шафера (Schaefer Model)

В данной модели [2] получено аналитическое выражение для расчета коэффициента поглощения, учитывающего наличие «хвоста Урбаха». Выражение для расчета коэффициента поглощения согласно данной модели имеет вид

$$\alpha_{\text{Schaefer}}(h\nu) = \alpha_g \left[\frac{\ln \left(1 + e^{\frac{h\nu - E_g}{p(h\nu)E_u}} \right)}{\ln 2} \right]^{p(h\nu)} \quad (1)$$

$$p(h\nu) = p_g + \frac{h\nu - E_g}{E_m}$$

где α_g – коэффициент поглощения при энергии равной ширине запрещенной зоны полупроводника;

E_u – характеристическая энергия Урбаха;

$p(h\nu)$ – функция, описывающая степенную зависимость коэффициента поглощения при энергиях больших E_g ;

p_g – константа, описывающая степенную зависимость при энергии равной E_g ;

E_m – характеристическая энергия (варьируемый параметр).

Стоит отметить, что данная модель, как и модель Адаши, не учитывает влияние температуры и концентрации примесей (эффект Бурштейна-Мосса).

Модель Боумика (Bhowmick Model)

В работе [3] авторы представляют усовершенствованную модель «правила Урбаха», описывающее спектральное поведение края поглощения полупроводникового материала, для определения величины оптической ширины запрещенной зоны.

Согласно данной модели характеристическая энергия (или энергия кроссовера), при которой собственное (фундаментальное) поглощение полупроводника переходит в «хвост Урбаха», определяется следующим образом:

$$E_{ch} = E_{g,opt} + \frac{kT}{2\sigma} \quad (2)$$

где σ – безразмерный параметр, определяющий крутизну спада коэффициента поглощения в области края поглощения;

$E_{g,opt}$ – оптическая ширина запрещенной зоны, которая в общем случае не совпадает с фундаментальной шириной запрещенной зоны E_g .

Анализ литературных источников [3] показал, что с большой точностью характеристическая энергия E_{ch} совпадает с фундаментальной шириной запрещенной зоны E_g .

Коэффициент фундаментального поглощения авторы в работе [3] определяют классической формулой:

$$\alpha(E) = A\sqrt{E - E_{g,opt}} \quad (3)$$

В общем случае в области края поглощения $\alpha(E)$ спадает экспоненциально («хвост Урбаха»), и может быть выражен следующим образом:

$$\alpha(E) = K \exp\left(\frac{\sigma E}{k_B T}\right). \quad (4)$$

Приравнивая оба выражения при характеристической энергии E_{ch} , можно вычислить коэффициент K :

$$K = A \exp\left(-\frac{\sigma E_g}{k_B T}\right) \sqrt{\frac{k_B T}{2\sigma}}. \quad (5)$$

Тогда выражение для расчета коэффициента поглощения полупроводникового материала с учетом «правила Урбаха» будет иметь следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{\text{Bhowmick}}(E) = A \sqrt{\frac{k_B T}{2\sigma}} \exp\left(\frac{\sigma(E - E_g)}{k_B T}\right) \\ \text{при } E < E_g \\ \alpha_{\text{Bhowmick}}(E) = A \sqrt{E - E_g + \frac{k_B T}{2\sigma}} \\ \text{при } E > E_g \end{array} \right. \quad (6)$$

Поведение края поглощения данная модель описывает с большой точностью, однако классическое выражение для фундаментального поглощения (3) является эмпирической и не содержит достаточной информацией об особенностях межзонных оптических переходов в полупроводнике и влиянии концентрации легирующей примеси.

Модель Андерсона (Anderson Model)

В работе Андерсона [4] рассматривается модель расчета коэффициента поглощения тройных твердых растворов $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ и $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с учетом эффекта Бурштейна-Мосса.

Построение модели расчета коэффициента поглощения для $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ производится на основе зонной модели Кейна, в которой

дисперсии краев энергетических зон имеют следующий вид:

$$E_c(k) = \frac{E_g}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{8k^2 P^2}{3E_g^2}} \right] + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (7a)$$

$$E_{hh}(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} \quad (7b)$$

$$E_{lh}(k) = -\frac{E_g}{2} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{8k^2 P^2}{3E_g^2}} \right] + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (7b)$$

где $E_c(k)$ – дисперсия края зоны проводимости;

$E_{hh}(k)$ – дисперсия подзоны тяжелых дырок;

$E_{lh}(k)$ – дисперсия подзоны легких дырок;

P – оптический матричный элемент, равный $8,7 \times 10^{-8}$ эВ·см для InSb [5].

Для прямых оптических переходов «подзона легких дырок – зона проводимости» коэффициент поглощения имеет вид:

$$\alpha_{lh}(\omega) = \frac{\left[1 + 2 \left(\frac{E_g}{\hbar\omega} \right)^2 \right]}{137\sqrt{6}\sqrt{\epsilon_\infty}} \frac{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - E_g^2}}{4P} BM_{lh} \quad (8)$$

где BM_{lh} – коэффициент Бурштейна-Мосса для подзоны легких дырок:

$$BM_{lh} = \frac{1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega + E_g - 2E_f}{2k_B T}\right) \right] \times \left[1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega - E_g + 2E_f}{2k_B T}\right) \right]} \quad (9)$$

Для прямых оптических переходов «подзона тяжелых дырок – зона проводимости» коэффициент поглощения имеет вид:

$$\alpha_{hh}(\omega) = \frac{1}{137\sqrt{\epsilon_\infty}} \frac{\sqrt{3/2}}{P} \frac{\sqrt{\hbar\omega(\hbar\omega - E_g)}}{1 + \frac{3}{4} \frac{\hbar^2 E_g}{m_0 P^2} \left(1 + \frac{m_0}{m_{hh}} \right) \left(\frac{2\hbar\omega}{E_g} - 1 \right)} BM_{hh} \quad (10)$$

где BM_{hh} – коэффициент Бурштейна-Мосса для подзоны тяжелых дырок:

$$BM_{hh} = \frac{1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{E_f + (\hbar^2 k_\omega^2 / 2m_{hh})}{k_B T}\right)\right] \times \left[1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega - E_f - (\hbar^2 k_\omega^2 / 2m_{hh})}{k_B T}\right)\right]}; \quad (11)$$

k_ω – волновой вектор:

$$k_\omega^2 = \frac{\frac{4}{3}P^2 + \frac{\hbar^2 E_g}{m_0} \left(1 + \frac{m_0}{m_{hh}}\right) \left(\frac{2\hbar\omega}{E_g} - 1\right)}{\frac{\hbar^4}{m_0^2} \left(1 + \frac{m_0}{m_{hh}}\right)^2} \times \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\frac{4\hbar^4}{m_0^2} \left(1 + \frac{m_0}{m_{hh}}\right)^2 \hbar\omega (\hbar\omega - E_g)}{\left[\frac{4}{3}P^2 + \frac{\hbar^2 E_g}{m_0} \left(1 + \frac{m_0}{m_{hh}}\right) \left(\frac{2\hbar\omega}{E_g} - 1\right)\right]^2}}\right) \quad (12)$$

Общий коэффициент поглощения рассчитывается как сумма двух составляющих:

$$\alpha_{\text{Anderson}}(\omega) = \alpha_{lh}(\omega) + \alpha_{hh}(\omega). \quad (13)$$

Модель Андерсона учитывает температурную зависимость и эффект Бурштейна-Мосса, однако, не учитывает наличие «хвоста Урбаха».

Модель расчета коэффициента поглощения

В данной работе расчет коэффициента поглощения антимионид индия основан на модели Андерсона [4] и учитывает прямые межзонные переходы из валентной зоны тяжелых и легких дырок в зону проводимости, эффект Бурштейна-Мосса, связанный со сдвигом края поглощения в вырожденных полупроводниках в коротковолновую область, а также правило Урбаха, учитывающее экспоненциальное поведение края поглощения, обусловленное наличием «хвостов» плотности состояний.

Значения коэффициентов Бурштейна-Мосса $BM_{lh}(\omega, E_F)$ и $BM_{hh}(\omega, E_F)$ зависят от положения уровня Ферми в полупроводнике. Для расчета уровня Ферми воспользуемся уравнением электронейтральности [6]:

$$\begin{aligned} n(E_F, T) + N_A^-(E_F, T) = \\ = p(E_F, T) + N_D^+(E_F, T) \end{aligned} \quad (14)$$

где $n(E_F, T) = N_c(T)F_c(E_F - E_c)$ – концентрация равновесных электронов;

$p(E_F, T) = N_v(T)F_v(E_v - E_F)$ – концентрация равновесных дырок;

$N_A^- = \frac{N_A}{1 + 4 \exp(E_a - E_F)}$ – концентрация отрицательно заряженных ионов акцепторов;

$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2 \exp(E_F - E_d)}$ – концентрация положительно заряженных ионов доноров;

$F_{c,v}(E) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} (1 + \alpha_{c,v} x)^{1/2} (1 + 2\alpha_{c,v} x) dx}{1 + \exp(x - E)}$ – интеграл Ферми-Дирака порядка 1/2 с учетом коэффициента непараболичности дисперсионной зависимости энергетических зон $\alpha_{c,v}$;

$N_{c,v}(T)$ – эффективные плотности состояний [6];

E_a – энергия ионизации акцептора;

E_d – энергия ионизации донора;

N_A – концентрация акцепторной примеси;

N_D – концентрация донорной примеси;

Зависимость края поглощения в области «хвоста» Урбаха согласно [3] имеет следующий вид:

$$\alpha_{\text{Urbach}}(\omega) = A \sqrt{\frac{k_B T}{2\sigma}} \exp\left(\frac{\sigma [\hbar\omega - E_g]}{k_B T}\right) \quad (15)$$

где $\sigma = 4,885$ для антимионид индия [3].

Определение параметра A сводится к решению уравнения сшивки выражений для расчета коэффициента поглощения (13) и (15)

при энергии, соответствующей оптической ширине запрещенной зоны [3]

$$A(T, E_F) \sqrt{\frac{k_B T}{2\sigma}} = \alpha_{\text{Anderson}} \left(\frac{E_g + \frac{k_B T}{2\sigma}}{\hbar}, E_F \right) \quad (16)$$

Таким образом аналитическое выражение для расчета коэффициента поглощения будет иметь следующий вид:

$$\alpha(\omega, E_F) = \begin{cases} \alpha_{\text{Anderson}}(\omega, E_F), & \text{при } \hbar\omega \leq E_g + \frac{k_B T}{2\sigma} \\ \alpha_{\text{Urbach}}(\omega), & \text{при } \hbar\omega \geq E_g + \frac{k_B T}{2\sigma} \end{cases} \quad (17)$$

Анализ результатов расчета

На рис. 1 представлены результаты расчета спектра поглощения антимонида индия при температуре 77 К, полученные с помощью различных моделей. На рисунке также приведены экспериментальные данные, полученные в работе [7].

Модель Боумика демонстрирует хорошее соответствие экспериментальным данным в области края поглощения, однако находится в значительном расхождении в области собственного поглощения материала из-за использования неточного корневого приближения. Модель Андерсона не учитывает правило Урбаха, и поэтому край поглощения имеет резкий спад на длине волны, соответствующей ширине запрещенной зоны InSb при 77 К. В отличие от модели Андерсона разработанная в данной работе модель учитывает экспоненциальное поведение края поглощения и с большой точностью соответствует экспериментальным данным, однако, вместе с тем поглощение в области 1–5 мкм несколько ниже экспериментального из-за неточного значения величины матричного оптического элемента, который согласно [5] составляет $8,7 \times 10^{-8}$ эВ·см. Для достижения большего соответствия величина оптического элемента должна составлять $5,5 \times 10^{-8}$ эВ·см, как показано на рис. 1.

В рамках данной работы были проведены исследования спектров пропускания пластины антимонида индия при комнатной температуре, результаты которых приведены на рис. 2.

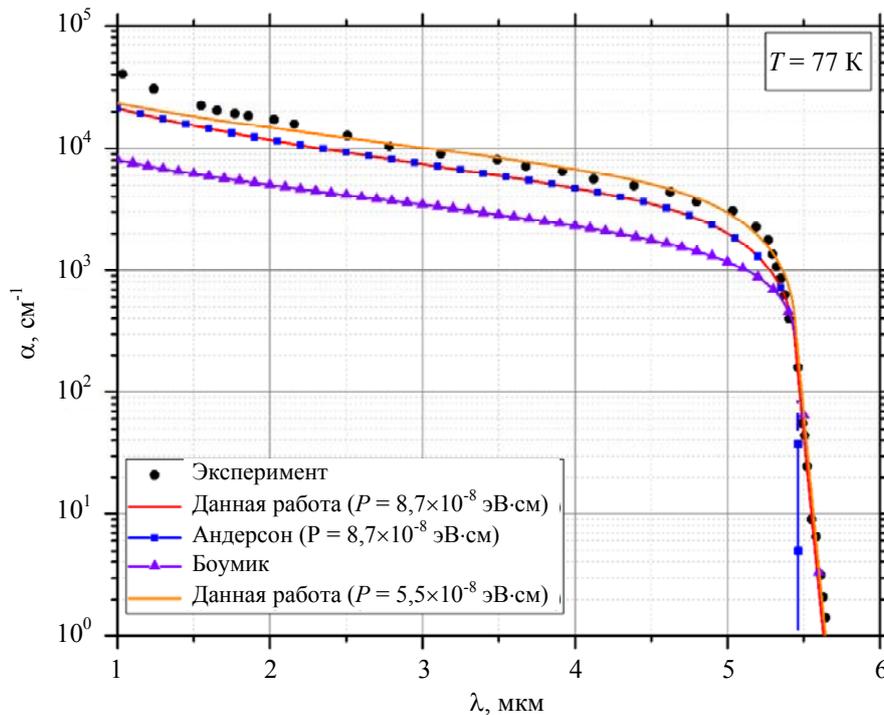


Рис. 1. Спектры поглощения InSb при температуре 77 К

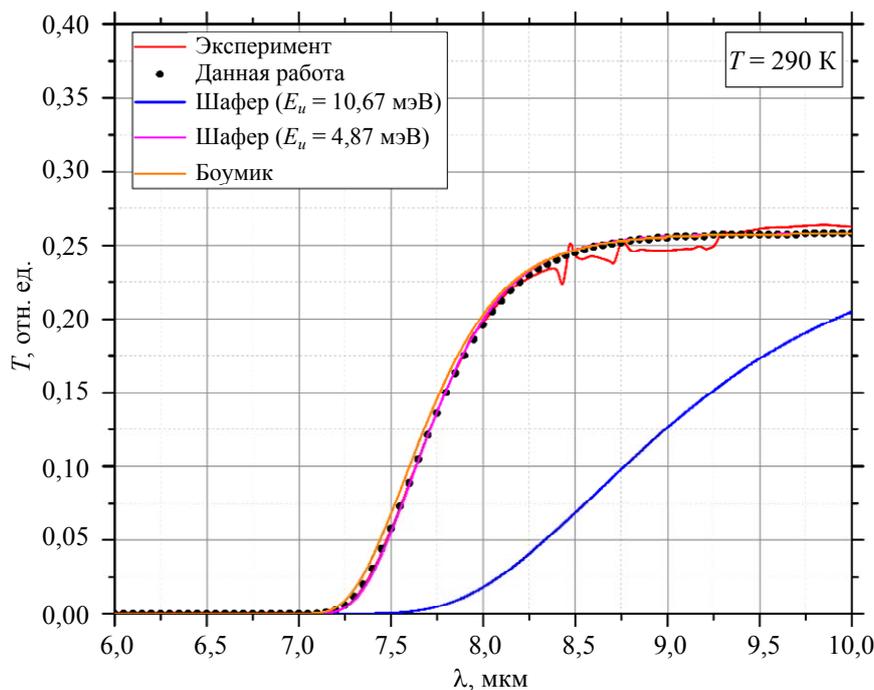


Рис. 2. Спектры пропускания InSb при комнатной температуре

Исследование спектра пропускания позволяет корректно оценить поведение края поглощения полупроводникового материала. Результаты расчета пропускания по модели Боумика и новой разработанной модели показывают высокую согласованность с экспериментальным спектром, подтверждая корректность использования модели Урбаха для расчета края поглощения. В работе Шафера [2] указана характеристическая энергия Урбаха для InSb, которая составляет 10,67 мэВ. Расчеты по модели Шафера с использованием этого значения существенно отличается от экспериментального, и для достижения требуемой точности характеристическая энергия Урбаха по модели Шафера должна составлять 4,87 мэВ.

Заключение

По результатам проведенного анализа существующих моделей расчета коэффициента поглощения антимонида индия были выделены их основные преимущества и недостатки. Для учета недостатков существующих моделей была разработана новая аналитиче-

ская модель на основе зонной модели Кейна, учитывающая температурную зависимость межзонного поглощения, эффект Бурштейна-Мосса и правило Урбаха. Данная модель позволит уменьшить погрешность определения параметров многослойных структур на основе InSb по сравнению с широко используемыми эмпирическими приближениями Адаши, Андерсона, Шафера и Боумика.

ЛИТЕРАТУРА

1. Adachi S. / Journal of Applied Physics. 1989. Vol. 66. № 12. P. 6030–6040.
2. Schaefer S. T. et al. / Journal of Applied Physics. 2020. Vol. 127. № 16. P. 165705.
3. Bhowmick M., Xi H., Ullrich B. / Materials. 2021. Vol. 14. № 7. P. 1639.
4. Anderson W. W. / Infrared Physics. 1980. Vol. 20. № 6. P. 363–372.
5. Vaillon R., Perez J. P., Lucchesi C., Cakiroglu D., Chapuis P. O., Taliercio T., Tournie E. / Optics Express. 2019. Vol. 27. № 4. P. A11.
6. Шалимова К. В. Физика полупроводников: учебное пособие. – М.: Энергия, 1976.
7. Kosogov O. V., Maramzina M. A. Fizika tehn. Poluprov. 1969. Vol. 3. № 11.

Analytical model of indium antimonide absorption

V. S. Kovshov^{1,2}

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

² Moscow Institute of Physics and Technology
9 Institutskiy per., Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia

Received 30.08.2023; accepted 16.09.2023

The existing analytical models for calculating the absorption coefficient are analysed. Their advantages and disadvantages are highlighted. A new analytical model of the absorption coefficient of indium antimonide, which takes into account the Burstein-Moss effect Urbach's rule and temperature dependence of the interband absorption, has been developed. A comparative analysis of the experimental transmission and absorption spectra of InSb with the calculation results has been carried out.

Keywords: InSb, absorption coefficient, Urbach's rule, Burstein-Moss effect.

DOI: 10.51368/1996-0948-2023-5-61-67

REFERENCES

1. Adachi S., Journal of Applied Physics **66** (12), 6030–6040 (1989).
2. Schaefer S. T. et al., Journal of Applied Physics **127** (16), 165705 (2020).
3. Bhowmick M., Xi H. and Ullrich B., Materials **14** (7), 1639 (2021).
4. Anderson W. W., Infrared Physics **20** (6), 363–372 (1980).
5. Vaillon R., Perez J. P., Lucchesi C., Cakiroglu D., Chapuis P. O., Taliercio T. and Tournie E., Optics Express **27** (4), A11 (2019).
6. Shalimova K. V., Fizika poluprovodnikov: uchebnoe posobie, Moscow, Energiya, 1976.
7. Kosogov O.V. and Maramzina M. A., Fizika tehn. Poluprov **3** (11), (1969).