ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 6, № 3 (2002) с. 329–336
JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 6, No. 3 (2002) p. 329–336

ВПЛИВ ВНУТРІШНІХ ЛОКАЛЬНИХ ДЕФОРМАЦІЙ, КОМПОЗИЦІЙНОЇ НЕВПОРЯДКОВАНОСТИ ТА ПІДКЛАДКИ НА ОПТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ $InAs_xSb_{1-x}$

Я. І. Виклюк, В. Г. Дейбук
Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна
(Отримано 24 листопада 2001 р.; в остаточному вигляді — 30 квітня 2002 р.)

Досліджено електронну зонну структуру твердих розчинів $InAs_xSb_{1-x}$ методом локального модельного псевдопотенціялу. Локальні деформації ґратки взято до уваги при розрахунках деформаційних потенціялів, а також залежності ширини забороненої зони від складу x твердого розчину. Врахування внутрішніх локальних деформацій та композиційної невпорядкованости у сплавах $InAs_xSb_{1-x}$ дозволяє коректно пояснити їхні основні оптичні характеристики. Вивчено вплив підкладки на оптичні властивості псевдоморфних плівок. Показано, що біаксіяльні деформації, які виникають при цьому, по-різному впливають на зміну положення піків $E1$, $E1+\Delta1$, $E2$ та $E2+\Delta2$.

Ключові слова: псевдопотенціял, композиційна невпорядкованість, локальні, біаксіяльні деформації.

PACS number(s): 68.65.+g

I. ВСТУП

Вузькощілинні тверді розчини заміщення $InAs_xSb_{1-x}$ мають найменшу ширину забороненої зони серед усіх використовуваних III–V напівпровідників та їхніх сплавів і є перспективними матеріялами для твердотільної електроніки. Вони викликають підвищений інтерес у зв'язку з широким використанням в оптоелектронних приладах середнього інфрачервоного діяпазону при створенні інфрачервоних детекторів, низькошумних фільтрів систем зв'язку та лазерів із плавною перебудовою довжини хвилі [1,2].

Уміння розраховувати електронну структуру та оптичні характеристики напівпровідникових сплавів є важливою передумовою аналізу фізичних явищ, що спостерігаються як у вказаних матеріялах, так і в приладах на їхній основі. У невироджених сплавах, однак, унаслідок відсутности трансляційної інваріянтности, електронні хвильові функції практично досить складно обчислювати. Ця обставина зумовила інтерес до різного роду наближених підходів. На щастя, спостережувані фізичні величини не залежать від деталей упорядкування атомів у сплаві й можуть бути теоретично отримані конфіґураційним усередненням. Наближення віртуального кристала (VCA), крім цього, допускає, що матеріял є майже ідеальним псевдобінарним сплавом, у якому атоми As та Sb утворюють одну гранецентровану підґратку, а атоми In знаходяться у вузлах іншої, зсунутої на вектор $(1/4, 1/4, 1/4)a$. Електронну структуру сплаву можна отримати усередненням параметрів складових сполук. Обмеження у використанні наближення віртуального кристала стають очевидними при виникненні розбіжностей між обчисленими із зонної структури ширинами заборонених зон та спостережуваними в оптичних експериментах. Зокрема, наближення віртуального кристала приводить до лінійної зміни забороненої зони у сплавах, тоді як в $InAs_xSb_{1-x}$ залежність $E_g(x)$ є істотно нелінійною і має значний прогин з мінімумом 0.08 еВ при $x = 0.37$, який значно менший за ширини заборонених зон складових сполук (0.17 еВ для InSb та 0.354 еВ для InAs) [3].

Незастосовність VCA проявляється також при формуванні впорядкованих структур нижчої симетрії та при ослабленні sp^3 зв'язків в одній із підґраток, що веде до селективної локалізації та переносу заряду [4]. Для пояснення таких явищ було використано першопринципні методи та наближення когерентного потенціялу (CPA). Однак кількісна теорія сплавів у такому підході на сьогодні не завершена, що зумовлено невдачами в апріорних розрахунках зонної структури елементарних та бінарних напівпровідників та їхніх сплавів. Виходом із цієї ситуації може бути удосконалення наближення віртуального кристала сплаву введенням додаткового потенціялу, пов'язаного з композиційною невпорядкованістю сплаву.

Крім цього, довжини зв'язків у потрійних твердих розчинах по-різному залежать від концентрації x, що може привести до виникнення внутрішніх локальних деформацій [5], які впливають на динаміку електронних станів зі зміною складу твердого розчину. Наявність останніх в $InAs_xSb_{1-x}$ також було враховано в наших розрахунках.

Фізичні параметри $InAs_xSb_{1-x}$ досліджено в низці робіт [1,2,6] для всього діяпазону концентрацій. У них показано, що цей твердий розчин заміщення утворює переважно структуру сфалериту з прямою забороненою щілиною в центрі зони Бріллюена. Сталі ґраток бінарних сполук при 0 K для InSb — 6.478 Å, InAs — 6.055 Å [3]. Експериментальні дослідження зонної структури цього твердого розчину базувались на результатах вимірювань електровідбивання та спектрів фотолюмінісценції поблизу фундаментального краю поглинання [6,7].

Незважаючи на те, що електронні та оптичні властивості $InAs_xSb_{1-x}$ мають велике практичне значення, детальні їх розрахунки досі не були зроблені. Не вияснєним залишається й фізичний механізм прогину забороненої зони $E_g(x)$ та вищих енерґетичних зон. У цій статті ми дослідили електронну зонну структуру за допомогою методу локального модельного псевдопотенціялу, що включає деформаційно-залежну поправку [8] у наближенні віртуального кристала з урахуванням спін-орбітальної взаємодії. Взяття до уваги внутрішніх локальних деформацій дозволило пояснити лише частину прогину концентраційної залежности ширини забороненої зони. Тому ми розглянули модифіковане наближення віртуального кристала, зваживши в потенціялі на вплив композиційної невпорядкованости потрійного розчину.

Як відомо, поряд з об'ємними зразками великий практичний інтерес становлять псевдоморфні плівки. Тому нашим завданням було також дослідити вплив деформацій з боку підкладки на зонну структуру та оптичні властивості $InAs_xSb_{1-x}$. Для цього ми розглянули підкладки InSb, AlSb та InAs, які створюють у плівці деформації різного типу.

II. МЕТОДИКА РОЗРАХУНКУ

Електронну зонну структуру ми розраховували методом локального модельного псевдопотенціялу, який дозволяє коректно отримати електронні характеристики різноманітних напівпровідникових структур. На відміну від традиційного емпіричного псевдопотенціялу $v(q)$, значення якого задані лише для дискретних хвильових векторів, метод модельного псевдопотенціялу пропонує моделювати псевдопотенціял атома певною функціональною формою, у якій значення хвильового вектора можуть змінюватись неперервно. Цей метод у базисі плоских хвиль приводить до секулярної задачі [9]:

$$\det\left|\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}-\mathbf{G})^2-E(\mathbf{k})\right)\delta_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}\delta_{S,S'}\right.$$
$$\left.+V_{\rm ps}(|\mathbf{G}-\mathbf{G}'|)\delta_{S,S'}+V_{\rm SO}^{SS'}(\mathbf{G},\mathbf{G}')\right|=0, \qquad (1)$$

де $\mathbf{G},\mathbf{G}'$ — вектори оберненої ґратки. Перший член відповідає кінетичній енерґії, другий — локальному модельному псевдопотенціялові $V_{\rm ps}(|\mathbf{G}-\mathbf{G}'|)$, третій — спін-орбітальній взаємодії:

$$V_{\rm ps}(G)=V_S(G)\cos(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau})+iV_{\rm A}(G)\sin(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}), \qquad (2)$$

$$V_{\rm SO}^{SS'}(\mathbf{G},\mathbf{G}')=(\mathbf{G}\times\mathbf{G}')\sigma_{S,S'}\Big(-i\lambda^{\rm S}\cos(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\boldsymbol{\tau}$$
$$+\lambda^{\rm A}\sin(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\boldsymbol{\tau}\Big), \qquad (3)$$

де $V_{\rm S}(G)$ та $V_{\rm A}(G)$ — симетричний та антисиметричний локальні формфактори, S та S' — спінові стани, $\boldsymbol{\tau}=(a/8)[1,1,1,]$, a — постійна ґратки, $\sigma_{S,S'}$ — матриці Паулі, $\lambda^{\rm S}$, $\lambda^{\rm A}$ — параметри спін-орбітальної взаємодії. Причому

$$V_{\rm S}(G)=\frac{1}{2}(V_1(G)+V_2(G)),$$
$$V_{\rm A}(G)=\frac{1}{2}(V_1(G)-V_2(G)), \qquad (4)$$

де $V_1(G)$ та $V_2(G)$ — псевдопотенціяли окремих атомів.

Вибір функціональної форми екранованого псевдопотенціялу диктується умовою достатньої його гнучкости при описі можливо більшої кількости фізичних характеристик. При цьому кількість параметрів псевдопотенціялу повинна бути в розумних межах, а самі параметри не повинні значно змінюватися при оптимізації електронної структури. Виберімо псевдопотенціял окремого атома у формі [8]:

$$v_\alpha(G)=a_{0\alpha}\frac{G^2-a_{1\alpha}}{a_{2\alpha}\exp(a_{3\alpha}G^2)-1}, \qquad (5)$$

де a_0,a_1,a_2,a_3 — підгінні параметри.

Вплив температури на зонну структуру враховували методом Брукса–Ю [9,10], у якому кожна фур'є-компонента α-го псевдопотенціялу коректується за допомогою фактора Дебая–Уоллера.

Згідно з законом Веґарда й наближенням віртуального кристала (VCA) у твердому розчині $InAs_xSb_{1-x}$ постійна ґратки і псевдопотенціяли визначаються як лінійні комбінації відповідних величин для InAs і InSb:

$$a_{\rm V}=a_{\rm InAs}x+a_{\rm InSb}(1-x),$$
$$V_{\rm VCA}=V_{\rm InAs}x+V_{\rm InSb}(1-x), \qquad (6)$$

де $a_{\rm V}$ і $V_{\rm VCA}$ — постійна ґратки і псевдопотенціяльний форм-фактор твердого розчину заміщення.

Однак закон Веґарда виконується не завжди, й залежність сталої ґратки потрійного розчину є нелінійною. Це пов'язано з тим, що в потрійному розчині виникають внутрішні локальні деформації за рахунок різних довжин зв'язку між атомами в InAs та InSb [5].

Найпослідовнішою процедурою врахування відхилення постійної ґратки від правила Веґарда є розрахунок рівноважного об'єму, який відповідає мінімуму вільної енерґії розчину $InAs_xSb_{1-x}$. Проте це дуже складне завдання, яке вимагає обчислення повної внутрішньої енерґії та коливної ентропії. У цій праці відхилення рівноважного об'єму розчину $InAs_xSb_{1-x}$

від правила Веґарда враховано так. Оскільки формфактори псевдопотенціялу залежать від об'єму, запишемо формфактор атома α-го сорту в такому вигляді:

$$v_\alpha(G,\varepsilon) = v_\alpha(G)(1+\delta v_\alpha(\varepsilon)). \tag{7}$$

Параметр $\delta v_\alpha(\varepsilon)$ визначали за методикою авторів [8]:

$$\delta v_\alpha(\varepsilon) = a_{4\alpha} Tr(\varepsilon), \tag{8}$$

де $\mathrm{Tr}(\varepsilon)$ обчислено як відносну усереднену зміну об'єму реальної елементарної комірки щодо ідеальної, розрахованої за законом Веґарда; $a_{4\alpha}$ — параметр, який вираховано з умови рівности деформаційного потенціялу забороненої зони в точці Γ, експериментально визначеному для бінарних сполук InAs та InSb [11]. Деформаційний потенціял забороненої зони визначається згідно з:

$$a_g = V\frac{\partial E_{\mathrm{gap}}}{\partial V}. \tag{9}$$

Деформаційний потенціял максимуму валентної зони a_v знаходимо аналогічно, тоді деформаційний потенціял мінімуму зони провідности $a_c = a_g + a_v$.

Вплив композиційної невпорядкованости можна врахувати, доповнивши псевдопотенціял відповідним періодичним доданком:

$$V_{\mathrm{Alloy}} = V_{\mathrm{ps}} + V_{\mathrm{dis}}. \tag{10}$$

Явний вигляд V_{dis} можна отримати, ввівши ймовірності утворення композиційної невпорядкованости з таких міркувань. Реальний синтез твердого розчину відбувається в умовах, відмінних від термодинамічної рівноваги, за яких можуть виникати різні дефекти структури [12]. Композиційна невпорядкованість є тоді, коли атом займає не своє стехіометричне положення в одній з двох гранецентрованих ґраток. У нашому випадку це відбувається, коли атоми Sb або As займають місце In і навпаки. Позначмо через W_{In}, xW_{As}, $(1-x)W_{\mathrm{Sb}}$ середні ймовірності того, що відповідно атоми In, As, Sb займають позиції у власній підґратці розчину $\mathrm{InAs}_x\mathrm{Sb}_{1-x}$. Тоді усереднені ймовірності перебування у вузлах іншої підґратки для цих атомів відповідно дорівнюють: $1-W_{\mathrm{In}}$, $x(1-W_{\mathrm{As}})$, $(1-x)(1-W_{\mathrm{Sb}})$. Згідно з такими означеннями формфактори середнього псевдопотенціялу на вузлах обох підґраток набувають значень [10,13]:

$$V_1 = V_{\mathrm{As}}xW_{\mathrm{As}} + V_{\mathrm{Sb}}(1-x)W_{\mathrm{Sb}} + V_{\mathrm{In}}(1-W_{\mathrm{In}}), \tag{11}$$
$$V_2 = V_{\mathrm{As}}x(1-W_{\mathrm{As}}) + V_{\mathrm{Sb}}(1-x)(1-W_{\mathrm{Sb}}) + V_{\mathrm{In}}W_{\mathrm{In}}.$$

З (11) та (4) виходить, що композиційна невпорядкованість сплаву не змінює симетричних формфакторів.

Припустимо, що ступінь композиційної невпорядкованости є максимальним при $x = 0.5$ та дорівнює нулеві в бінарних сполуках. На цій підставі будемо вважати, що:

$$1-W_{\mathrm{In}} = 1-W_{\mathrm{As}} = 1-W_{\mathrm{Sb}} = 4\alpha x(1-x), \tag{12}$$

де α — коефіцієнт, що характеризує композиційну невпорядкованість при $x = 0.5$. Тоді формфактори твердого розчину визначаємо виразом:

$$\begin{aligned} V_{\mathrm{S}}^{\mathrm{Alloy}}(G) &= V_{\mathrm{S}}^{\mathrm{InAs}}(G)x + V_{\mathrm{S}}^{\mathrm{InSb}}(G)(1-x), \\ V_{\mathrm{A}}^{\mathrm{Alloy}}(G) &= (1-8\alpha x(1-x))(V_{\mathrm{A}}^{\mathrm{InAs}}(G)x + V_{\mathrm{A}}^{\mathrm{InSb}}(G)(1-x)). \end{aligned} \tag{13}$$

Отже,

$$\begin{aligned} V_{\mathrm{dis}} = -8i\alpha x(1-x)(V_{\mathrm{A}}^{\mathrm{InAs}}(G)x \\ + V_{\mathrm{A}}^{\mathrm{InSb}}(G)(1-x))\sin(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}). \end{aligned} \tag{14}$$

У тонких псевдоморфних плівках потрійного сплаву виникають додатково біаксіяльні деформації внаслідок неузгодженості постійної ґраток плівки та підкладки. Стиск або розтяг на межі підкладка-сплав приводять до розтягу або стиску плівки відповідно в напрямку, перпендикулярному до межі розділу.

Компоненти тензора деформації в цьому випадку можна записати як [14]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{yy} = -\delta, \\ \varepsilon_{zz} &= \frac{2C_{12}}{C_{11}}\delta, \end{aligned} \tag{15}$$

де $\delta = (a_{\mathrm{InAsSb}} - a_{\mathrm{sub}})/a_{\mathrm{sub}}$, a_{InAsSb}, a_{sub} — постійні ґратки об'ємного сплаву та підкладки, відповідно C_{11} та C_{12} — пружні постійні плівки.

Основним доказом коректности розрахунку зонної структури є добре узгодження оптичних характеристик з експериментальними даними. Електронна зонна структура безпосередньо пов'язана з комплексною діелектричною функцією напівпровідника $\varepsilon(E) = \varepsilon_1(E) + i\varepsilon_2(E)$. Знання комплексної діелектричної функції дозволяє відшукати інші оптичні характеристики, зокрема показник заломлення середовища (n), коефіцієнт поглинання (α), коефіцієнт відбивання (R) та інші. Уявна частина діелектричної функції [9]:

$$\varepsilon_2(E) = \frac{4\pi^2\hbar^2e^2}{m^2E^2}\sum_{vc}\int\limits_{ZB}\frac{2d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}|\mathbf{eM}_{vc}(\mathbf{k})|^2 \times \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - E), \tag{16}$$

де

$$\mathbf{eM}_{vc}(\mathbf{k}) = \langle\psi_{ck}|\mathbf{ep}|\psi_{vk}\rangle, \tag{17}$$

$\mathbf{e}$ — вектор поляризації, $\mathbf{p}$ — оператор імпульсу.

Інтеґрування здійснюється за першою зоною Бріллюена. Сума проводиться по станах валентних зон (v) і зон провідности (с). Дійсну частину діелектричної функції знаходимо з розв'язку інтеґральних співвідношень Крамерса–Кроніґа.

III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

Процедуру знаходження атомних псевдопотенціялів зводили до розрахунку рівноважної зонної структури бінарних напівпровідників InAs і InSb [15]. Після цього коефіцієнти a_4 катіонів вибирали так, щоб узгодити розраховані значення гідростатичних деформаційних потенціялів з експериментальними [11].

	InSb		InAs	
	In	Sb	In	As
a_0	0.238	0.1442	0.375	0.169
a_1	6.8	9.123	6.95	9.0123
a_2	5.052	1.997	5.052	1.972
a_3	0.157	0.225	0.167	0.209
a_4	6.4	0	2.75	0
λ^{S}	0.0053		0.0031	
λ^{A}	0.001		0.00019	

Таблиця 1. Псевдопотенціяльні параметри, які використано при розрахунках InSb та InAs.

У таблиці 1 наведено значення псевдопотенціяльних параметрів a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, а також λ^{S}, λ^{A}. Розраховані енерґетичні міжзонні віддалі в InAs та InSb у деяких високосиметричних точках зони Бріллюена у порівнянні з отриманими методом нелокального модельного псевдопотенціялу [9], kp-методом [16] й експериментальними значеннями наведено в таблиці 2.

	InSb				InAs			
	Теоретичні разрахунки			Експериментальні дані	Теоретичні разрахунки			Експериментальні дані
	Наші	НЕПП [9]	k-p [16]		Наші	НЕПП [9]	k-p [16]	
$\Gamma_{6C} - \Gamma_{8V}$	0.24	0.25	0.235	0.235 [15]	0.42	0.37	0.417	0.42 [15]
$L_{6C} - L_{4,5V}$	1.84	1.99	0.93	1.9 [15]	2.53	2.53	1.133	2.3 [15]
$X_{6C} - X_{7V}$	3.54	3.95	0.63	—	4.57	4.65	1.433	4.5 [15]
Δ_0	0.88	—	0.81	0.98 [15]	0.3	—	0.39	0.43 [15]
a_g	−7.7	—	−6.58	−7.7 [11]	−6.0	—	−4.08	−6.0 [11]
a_v	−7.4	—	−0.36	−6.9 [11]	−10.5	—	−1.0	—
a_c	−15.2	—	−6.94	−14.6 [11]	−16.5	—	−5.08	—

Таблиця 2. Енерґії міжзонних віддалей (еВ) InSb та InAs у деяких високосиметричних точках зони Бріллюена та деформаційні потенціяли при $T = 0$.

Як видно, наші розрахунки добре узгоджуються з експериментом, що дозволяє нам перейти до розгляду потрійного об'ємного сплаву. Експериментально відомо [6,20], що залежність $E_g(x)$ має значний прогин (крива 4 на рис. 1). Причому при $x \approx 0.37$ ширина забороненої зони сплаву (0.08 еВ) буде меншою за ширину забороненої зони InSb (0.17 еВ). Попередні теоретичні праці [17–19] пояснювали цей ефект лише наявністю композиційної невпорядкованости. Однак на ширину забороненої зони потрійного сплаву впливають також внутрішні локальні деформації, які відбуваються у сплавах. Проаналізуймо відносний внесок кожного із цих факторів. Провівши розрахунок за законом Веґарда в наближені віртуального кристала, ми отримали залежність $E_g(x)$, яка має незначний прогин у бік вищих енерґій (крива 1 на рис. 1). Така поведінка залежности $E_g(x)$ була передбачена й в інших працях [17,18]. Урахувавши вплив внутрішніх локальних деформацій, отримаємо значний прогин залежности в бік менших енерґій. Однак прогин експериментальної кривої є набагато більшим, тому врахуємо композиційну невпорядкованість сплаву. Як видно з рис. 1 (крива 3), врахування останньої дає нам непоганий збіг нашої кривої з експериментальною при $\alpha = 0.05$. Отже, можна зробити висновок, що внесок локальних деформацій у прогин $E_g(x)$ складає $\sim 30\%$, тоді як вплив композиційної невпорядкованости пояснює $2/3$ прогину. Іншими словами, для коректного розрахунку зонної структури потрійних розчинів необхідно враховувати як внутрішні локальні деформації, так і композиційну невпорядкованість. На рис. 2 (суцільна крива) показано, що вплив указаних факторів на міжзонні віддалі в точках L та X є незначним.

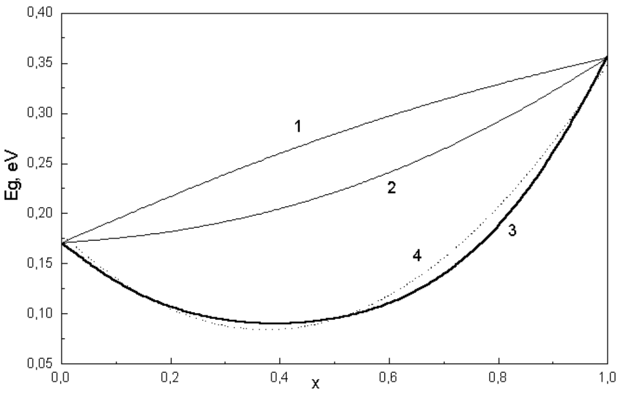

Рис. 1. Концентраційна залежність ширини забороненої зони $InAs_xSb_{1-x}$ ($T = 300$ K): 1. Стала ґратки змінюється лінійно, вплив внутрішніх локальних деформацій не врахований ($a_4 = 0$), композиційної невпорядкованости немає ($\alpha = 0$). 2. З урахуванням впливу внутрішніх локальних деформацій, ($\alpha = 0$). 3. З урахуванням впливу внутрішніх локальних деформацій та композиційної невпорядкованости ($\alpha = 0.05$). 4. Експериментальна крива [20].

Як було сказано вище, суттєвим доказом коректности розрахунку зонної структури є добре узгодження розрахованих оптичних характеристик з експериментальними. Тому, використовуючи розраховану зонну структуру, перейдімо до знаходження діелектричної функції та оптичних характеристик $InAs_xSb_{1-x}$.

Уявну частину діелектричної функції обчислювали згідно з рівнянням (16). При підсумовуванні було враховано вісім верхніх валентних зон і чотири нижні зони провідности. Інтеґрування проводили за першою зоною Бріллюена методом тетраедрів [21], причому зона Бріллюена була розділена на 3000 рівновеликих тетраедрів. Матричні елементи (17) розраховували на отриманих власних псевдохвильових функціях і контролювали за допомогою правил відбору. При розрахунку $\varepsilon_2(E)$ екситонних ефектів не враховували. Результати обчислень для бінарних сполук, усереднені за різними напрямками вектора поляризації, подано на рис. 3 в порівнянні з експериментальними даними.

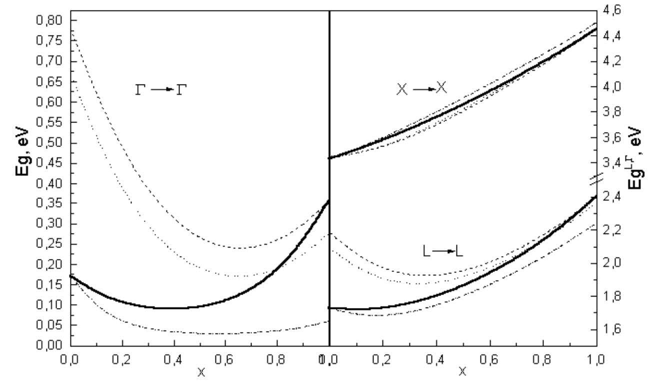

Рис. 2. Концентраційна залежність міжзонних віддалей у високосиметричних точках зони Брілюена ($T = 300$ K): суцільна крива — об'ємний сплав $InAs_xSb_{1-x}$; штрих-пунктирна крива — $InAs_xSb_{1-x}/InSb$; штрихова крива — $InAs_xSb_{1-x}/InAs$; пунктирна крива — $InAs_xSb_{1-x}/AlSb$.

У структурі $\varepsilon_2(E)$ InSb можна виділити такі особливості. Край поглинання починається з 0.17 еВ, далі йдуть спін-орбітально разщеплені піки $E1$ при 1.86 еВ та $E1{+}\Delta1$ при 2.39 еВ, що відповідають експериментальним значенням 1.9 еВ та 2.4 еВ [15] відповідно (переходи в напрямках $\Lambda_{v4,5}$–Λ_{c6} і Λ_{v6}–Λ_{c6} ближче до точки L). Найінтенсивніший пік $E2$ при 3.85 еВ експериментально спостерігається при 4.44 еВ і є спін-орбітально розщепленим. Спін-орбітальне розщеплення піка $E2$ на експерименті можна помітити лише з аналізу другої похідної $\frac{d^2\varepsilon_2}{dE^2}$. Цей пік відповідає переходам Δ_{v7}–Δ_{c6} і Δ_{v6}–Δ_{c6} ближче до точки X. Далі йде слабкий пік при 4.83 еВ (переходи $\Lambda_{v4,5}$–Λ_{c7} і Λ_{v6}–Λ_{c7}) і сильніший пік при 6.4 еВ (переходи в напрямку Σ).

Крива $\varepsilon_2(E)$ при InAs починається з 0.35 еВ та містить дуже гострий пік найбільшої інтенсивности $E2$ при 4.6 еВ, якому відповідає експериментальне значення — 4.59 еВ [15] (переходи Δ_{v7}–Δ_{c6} і Δ_{v6}–Δ_{c6} ближче до точки X). Спін-орбітального розщеплення $E2$ явно не спостерігаємо. Спін-орбітально розщеплені піки $E1$ при 2.52 еВ та $E1{+}\Delta1$ при 2.78 еВ також добре узгоджуються з експериментом (2.53 еВ та 2.75 еВ відповідно [15]) і визначаються переходами в напрямках $\Lambda_{v4,5}$–Λ_{c6} і Λ_{v6}–Λ_{c6} ближче до точки L.

Далі йде невеличкий пік при 5.6 еВ (переходи $\Lambda_{v4,5}$–Λ_{c7} і Λ_{v6}–Λ_{c7}). Усі піки мають складну тонку структуру і визначаються не тільки зазначеними переходами, але й переходами в об'ємі зони Бріллюена.

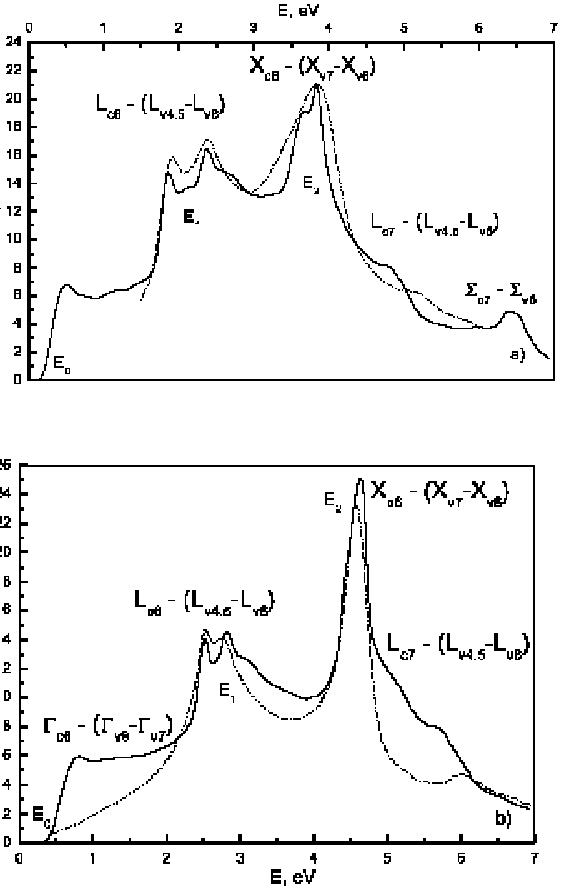

Рис. 3. Уявна частина (ε_2) діелектричної функції InSb — (a) та InAs — (b) ($T = 300$ K): суцільні лінії — наші розрахунки; штрихові — експериментальні дані [15].

Для потрійних розчинів заміщення $InAs_xSb_{1-x}$ при розрахунку $\varepsilon_2(E)$ врахуємо вплив внутрішніх локальних деформацій та композиційну невпорядкованість. Результати наших розрахунків подано на рис. 4 разом з експериментальними кривими. Вони відзначаються низкою особливостей. Криві мають незначний прогин, тоді, коли ширина забороненої зони, як було показано вище (рис. 1), має дуже великий прогин. Це зумовлено тим, що піки $E1$ та $E2$ відповідають прямим міжзонним переходам електронів у високосиметричних напрямках зони Бріллюена L та X відповідно. Отже, концентраційна залежність $E1$ та $E2$ має нагадувати хід кривих $E_L(x)$ та $E_X(x)$ (рис. 2). Звідси можна зробити висновок, що прогин концентраційної залежности ширини забороненої зони впливає на край поглинання $E0$ та $E1$, однак слабко відчувається в поведінці $E2$.

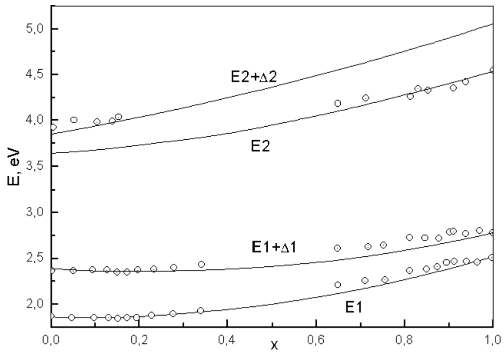

Рис. 4. Концентраційна залежність піків $E1$, $E1{+}\Delta1$, $E2$ та $E2{+}\Delta2$ для об'ємного зразка: суцільні лінії — наші розрахунки; точки — експериментальні дані [6].

Наступним нашим кроком було дослідження впливу підкладки на зонну структуру та оптичні властивості потрійного розчину заміщення $InAs_xSb_{1-x}$.

Епітаксіяльне вирощування напівпровідникових сплавів із параметром ґратки, що відрізняється від параметра ґратки підкладки, веде до деформації неузгодженості в епітаксіяльному шарі. Така деформація може пружно релаксувати за допомогою тетрагональної дисторсії при умові, що товщина епішару не перевищує критичної (псевдоморфна плівка). Зі збільшенням неузгодженості сталих ґратки епішару й підкладки або товщини шару останній буде релаксувати в напрямку його об'ємної структури з утворенням дислокацій невідповідности.

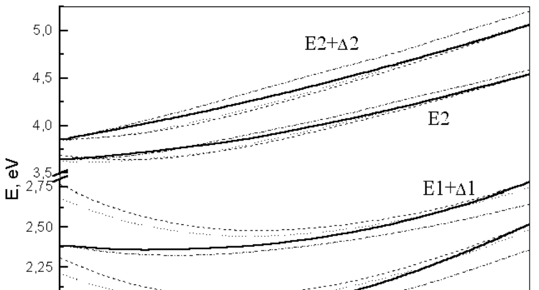

Рис. 5. Концентраційна залежність піків $E1$, $E1{+}\Delta1$, $E2$ та $E2{+}\Delta2$ для об'ємного зразка в порівнянні з підкладками: суцільна крива — об'ємний сплав $InAs_xSb_{1-x}$; штрих-пунктирна крива — $InAs_xSb_{1-x}/InSb$; штрихова крива — $InAs_xSb_{1-x}/InAs$; пунктирна крива — $InAs_xSb_{1-x}/AlSb$.

Для тонких псевдоморфних плівок $InAs_xSb_{1-x}$ оптичні характеристики вивчали теоретично в низці праць [17,18]. Було встановлено, що оптичні характеристики плівок відрізняються від об'ємних зразків і залежать від матеріялу підкладки та мають особливості концентраційної залежности $E1(x)$, $E2(x)$. Для їх пояснення, окрім вище вказаних факторів, які наявні в об'ємних зразках, ми врахували наявність біаксіяльної деформації, що з'являється в епітаксіяльній плівці під впливом підкладки. Форма вибраного псевдопотенціялу дозволяє врахувати біаксіяльну деформацію у плівці. Компоненти тензора деформації в цьому разі можна записати як (15).

Ми досліджували $InAs_xSb_{1-x}$ на трьох різних підкладках: InSb, InAs, AlSb. Такий вибір підкладок мотивувався тим, що в InAsSb/InSb з боку підкладки існували лише деформації біаксіяльного розтягу, а в InAsSb/InAs, навпаки — деформації біаксіяльного стиску. На противагу цим двом підкладкам стала ґратки AlSb більша за сталу ґратки InAs та менша за InSb. Тому в інтервалі $x = 0 \div 0.8$ в потрійному сплаві існуватимуть деформації біаксіяльного стиску з боку підкладки, а при $x = 0.8 \div 1$ — деформації біаксіяльного розтягу. Для підкладки InSb (рис. 2, штрих-пунктирна крива) при збільшенні концентрації x від 0 до 1 у сплаві виникають деформації біаксіяльного розтягу, які зменшують ширину забороненої зони щодо об'ємного зразка. При $x = 0.4 \div 0.8$ ширина забороненої зони практично не змінюється. Що стосується підкладки InAs (рис. 2, штрихова крива), то при зменшенні x від 1 до 0 у сплаві виникають деформації біаксіяльного стиску, які приводять до різкого збільшення ширини забороненої зони. Причому залежність $E_g(x)$ має сильний прогин, мінімум якого припадає на точку $x \approx 0.65$. Мінімуму же прогину об'ємного зразка відповідає $x \approx 0.4$. Якщо досліджувати підкладку AlSb, то, як було сказано вище, залежно від концентрації x у плівці відбуватиметься деформація біаксіяльного стиску або розтягу. $E_g(x)$ (рис. 2, пунктирна крива) буде теж мати сильний прогин, мінімум якого припадає на точку $x \approx 0.63$. При $x \approx 0.8$ (стала ґратки сплаву дорівнює сталій ґратки підкладки) криві залежності $E_g(x)$ для об'ємного та плівкового зразків перетнуться.

Розгляньмо, як змінюються відстані між верхньою валентною зоною та нижньою зоною провідности у високосиметричних точках зони Брілюена L та X з концентрацією x. Як видно з рис. 2, в цілому поведінка залежностей $E_L(x)$ для різних типів підкладок нагадує $E_g(x)$. Отже, можна зробити висновок, що при деформаціях стиску міжзонна віддаль у точці L збільшується і, навпаки, при деформаціях розтягу зменшується. В точці X ситуація дещо інша, а саме, вплив різних підкладок на міжзонну віддаль є незначним. Щобільше, для підкладки InSb при збільшенні x від 0 до 1 міжзонна віддаль збільшується, а для підкладки InAs — зменшується порівняно з об'ємним зразком. Звідси випливає, що при деформаціях стиску міжзонна віддаль у точці X зменшується, а при деформаціях розтягу збільшується. Така аномальна поведінка зонної структури має вплинути й на оптику. Розрахунки концентраційних залежностей піків $E1$, $E1+\Delta1$, $E2$ та $E2+\Delta2$ для різних підкладок наведені на рис. 5. Можна побачити, що $E1(x)$, $E1(x) + \Delta1(x)$ нагадує поведінку кривих $E_L(x)$, а $E2(x)$ та $E2(x) + \Delta2(x) - E_X(x)$. Отже, це є ще одним доказом того, що пік $E1$ зумовлений прямими переходами електронів у напрямку Λ, а $E2$ — в напрямках Δ. З рис. 5. видно, що концентраційна залежність піка $E2$ слабо залежить від вибору підкладки, на відміну від $E1$. Крім того, піки $E1$ та $E2$ по-різному реаґують на деформації. Так, при деформаціях розтягу (підкладка InSb) пік $E1$ зміщується в бік менших енерґій, $E2$, навпаки — в бік більших. А при деформаціях стиску (підкладка InAs) $E1$ прямує до більших, а $E2$ — до менших енерґій. З цього можна зробити висновок, що зонна структура потрійного твердого розчину заміщення по-різному реаґує на зовнішній тиск у різних точках зони Бріллюена.

IV. ВИСНОВКИ

Досліджено електронну зонну структуру твердих розчинів $InAs_xSb_{1-x}$ методом локального модельного псевдопотенціялу. Локальні деформації ґратки було взято до уваги при розрахунках деформаційних потенціялів, а також залежности ширини забороненої зони від складу x твердого розчину. Врахування внутрішніх локальних деформацій та композиційної невпорядкованости у сплавах $InAs_xSb_{1-x}$ дозволяє коректно пояснити їхні основні оптичні характеристики.

Вивчено вплив підкладки на оптичні властивості псевдоморфних плівок. Показано, що біаксіяльні деформації розтягу або стиску, які виникають при цьому, по-різному впливають на зміну положення піків $E1$, $E1+\Delta1$, $E2$ та $E2+\Delta2$.

[1] A. Rogalski, Prog. Quant. Electr. **13**, 191 (1989).

[2] Т. Н. Данилова, О. И. Евсеенко, А. Н. Именков *и др.*, Физ. техн. полупр. **31**, 662 (1997).

[3] *Hand Book Series on Semiconductor Parameters. V. 1,2*, edited by H. Levinstein, S. Rumyantsev, H. Shur (World Scientific London, 1996, 1999).

[4] M. Jaros, Rep. Prog. Phys. **48**, 1091 (1985).

[5] J. L. Martins, A. Zunger, Phys. Rev. B **30**, 6217 (1984).

[6] S. S. Vishnubhatla, B. Eyglunent, J. C. Woolley, Can. J. Phys. **47**, 1661 (1969).

[7] J. C. Osbourn, J. Vac. Sci. Technol. B **2**, 176 (1984).

[8] T. Matilla, L.-W. Wang, A. Zunger, Phys. Rev. B **59**, 15270 (1999).

[9] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors* (Berlin, Springer Verlag, 1988).

[10] С. В. Королюк, Я. И. Виклюк, В. Г. Дейбук, Укр. фіз. журн. **45**, 318 (2000).

[11] A. Blacha, H. Presting, M. Cardona, Phys. Status Solidi B **126**, 11 (1984).
[12] А. Н. Георгобиани, И. М. Тигиняну, Физ. техн. полупр. **22**, 3 (1988).
[13] А. П. Дмитриев, Н. В. Евлахов, А. С. Фурман, Физ. техн. полупр. **30**, 106 (1996).
[14] S. C. Jain, M. Willander, H. Maes, Semicond. Sci. Technol. **11**, 641 (1996).
[15] В. И. Гавриленко, А. М. Грехов, Д. В. Корбутяк, В. Г. Литовченко, *Оптические свойства полупроводников: Справочник* (Наукова думка, Киев, 1987).
[16] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. **89**, 5815 (2001).
[17] N. Bouarissa, Infrared Phys. & Technol. **40**, 423 (1999).
[18] N. Bouarissa, H. Aourag, Infrared Phys. & Technol. **40**, 343 (1999).
[19] В. Г. Дейбук, Укр. фіз. журн. **43**, 230 (1998).
[20] O. Berolo, J. C. Woolley, in *Proceedings of the 11th International Conference on the Physics of Semiconductirs* (PWN, Warsaw, 1972), p. 1420.
[21] G. Lehmann, M. Taut, Phys. Status Solidi B **54**, 469 (1972).

EFFECTS OF INTRINSIC LOCAL DEFORMATIONS, COMPOSITIONAL DISORDER AND SUBSTRATE ON THE OPTICAL PROPERTIES OF $InAs_xSb_{1-x}$

Y. I. Vyklyuk, V. G. Deibuk
Yu. Fed'kovych Chernivtsi National University,
2 Kotsiubynskogo Str., Chernivtsi, UA–58012, Ukraine,
e-mail: vdei@chdu.cv.ua

The electronic structure of the $InAs_xSb_{1-x}$ solid solution is calculated within the local model pseudopotential method and the virtual crystal approximation. Local strain of the lattice was taken into account in calculations of deformation potentials and dependence of band gap on composition x of solid solution. The main optical characteristics of $InAs_xSb_{1-x}$ alloys could be explained taking into account the existence of the internal local deformations and compositional disorder.

The influence of substrate on electronic band structure and optical properties of pseudomorphic thin films was also investigated. It was shown that biaxial deformation of compression and strain differently affect the position change of peaks $E1$, $E1+\Delta1$, $E2$, and $E2+\Delta2$.