

ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НЕВПОРЯДКОВАНИХ АЛМАЗОПОДІБНИХ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ ЗАМІЩЕННЯ $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ ТА ТОНКИХ ПЛІВОК НА ЇХ ОСНОВІ

Ю. Г. Королюк, В. Г. Дейбук, Я. І. Виклюк
Чернівецький національний університет імені Ю. Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна
(Отримано 17 березня 2003 р.; в остаточному вигляді — 11 вересня 2003 р.)

Досліджено методом локального модельного псевдопотенціалу, з урахуванням композиційної та позиційної неупорядкованості атомів, електронну зону структуру та розраховано на її основі діелектричні функції для $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ об'ємних та біаксіально деформованих твердих розчинів заміщення. Пояснено вплив різних механізмів розупорядкування та деформацій на особливості поведінки діелектричної функції, що були виявлені експериментально.

Ключові слова: псевдопотенціал, позиційна, композиційна неупорядкованість, локальні, біаксіальні деформації.

PACS number(s): 68.65.+g

I. ВСТУП

Останнім часом зросло активне дослідження ізовалентних сплавів на основі елементів IV групи як можливих кандидатів для створення інфрачервоних детекторів і фотоприймачів. Основною перевагою пристроїв на основі цих матеріалів є більша рухливість носіїв порівняно зі сплавами на основі сполук A^3B^5 та A^2B^6 , сумісність з добре розробленими кремнієвою та германієвою технологіями створення приладів. Ще однією перевагою є поява прямозонності в електронних властивостях деяких ізовалентних твердих розчинів IV групи, що розширює межі їх застосування в сучасній напівпровідниковій промисловості. До таких належать сплави $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$. Це нові матеріали, термодинамічно нестабільні майже по всьому діапазону x і не здатні сформувати тверді розчини заміщення в рівноважних умовах. Для їх отримання найбільш реальним є використання нерівноважних технологій вирощування, які обмежують процеси сегрегації та підвищують розчинність компонент. Такими технологіями є молекулярно-променева епітаксія й лазерна кристалізація [1]. Усі вказані тверді розчини елементів IV групи мають межі розчинності. В [2] ми показали розширення ділянок розчинності в біаксіально деформованих твердих розчинах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$, а також підвищення їхньої стабільності внаслідок релаксацій напруг на дислокаціях неузгодженості.

Нещодавно відновлено інтерес до $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ сплавів та надґраток на їх основі [1, 3]. Неузгодженість постійних ґраток германію і кремнію дорівнює $\sim 4\%$. Тому напруги й деформації, що виникають при формуванні цього твердого розчину, впливають на зонну структуру і властивості переносу [4]. Щобільше, вирощуючи Ge-Si шари на різних підкладках і варіюючи їх товщину, можна значно модифікувати електронні й оптичні властивості цього матеріалу [5]. Тепер гетероструктури на основі $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$ широко використовують для отримання біполярних гетеротранзисторів

[6], детекторів оптоволоконних ліній зв'язку [7], 2–12 мм інфрачервоних детекторів для дворозмірних площинних матриць нічного бачення й термобачення [8], інфрачервоних емітерів для чіп-в-чіп оптичного зв'язку в оптоволоконних комунікаціях [9, 10], хвильових модуляторів та ін. Але $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$ як матеріал напівпровідникової електроніки має низку недоліків, що обмежують його практичне використання. Це передусім наявність критичної товщини, яка знижує термодинамічну стабільність плівки $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$ за рахунок появи дислокацій неузгодженості. Так, при 20% Ge в розчині, що відповідає зміні ширини забороненої зони ~ 150 меВ, критична товщина становить ~ 15 нм [11]. Це значно обмежує можливість створення ІЧ-детекторів на основі $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ по всьому діапазону x . Практичне отримання плівки $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ на домірній підкладці Si обмежується вмістом компоненти Ge менше 70% [12]. На сьогодні труднощі, пов'язані з існуванням дислокацій неузгодженості в плівках цих матеріалів, розв'язують введенням буферних шарів (з постійною ґратки дещо більшою, ніж у підкладці) між підкладкою Si та плівкою $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ [13, 14]. Значним недоліком матеріалів є і далі висока технологічна температура отримання, що унеможливає нанометрову точність внесення домішок для створення високоякісних гетеропереходів [15, 16].

Наявність мінімуму нижньої зони провідності α -Sn в точці Γ дозволяє сподіватися на отримання прямозонних сплавів $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$. Проте в об'ємному випадку вони нестабільні. Це пояснюється тим, що компонента α -Sn є стабільною тільки при температурах нижчих за 13.2°C , рівноважна розчинність Sn в Ge менша за 1% [17], крім цього, олово є високолетким атомом у германієвій підґратці, що приводить до значної поверхневої сегрегації. Однак, незважаючи на це, нещодавно були отримані епітаксіальні плівки $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}(001)$ з $0 \leq x \leq 0.26$ методом низькотемпературної молекулярно-променевої епітаксії [18].

У твердому розчині $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$ ґраткова неузгодженість компонент досягає $\sim 17.9\%$. Псевдоморф-

ний шар $\text{Si}_{0.96}\text{Sn}_{0.04}$ був вирощений [19] методом молекулярно-променевої епітаксії з товщиною шару 150 нм. Унаслідок унікальних електронних властивостей сплави на основі Si, Ge з кубічним Sn можуть широко використовуватися в електронних й оптоелектронних гетероструктурах для створення ПЧ-детекторів, а також у лазерній техніці.

α -C, як відомо, є широкозонним матеріалом ($\Delta = 5.5$ eV), що робить його вірогідним кандидатом для створення широкозонних матеріалів на основі Si та високоінтегрованих з ним, що є важливим для створення оптоелектронних приладів, які працюють у високоенергетичних хвильових діапазонах. Але, на відміну від схожих стабільних систем $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, ґраткова неузгодженість у $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ досягає $\sim 41.6\%$ і до того ж навіть в околі точки плавлення Si розчинність C не перевищує 10^{-6} ат.%. Нещодавно проблема високої нестабільності $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ була частково розв'язана [20]. Використовуючи метод твердофазної епітаксії, вдалося виростити псевдоморфний шар $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ з $0 \leq x \leq 0.002$ і стабільну при $T = 800^\circ\text{C}$ надґратку $\text{Si}_{0.997}\text{C}_{0.003}$.

Досягнуті успіхи в технології вирощування вказаних твердих розчинів дають змогу перейти до питань їх практичного використання. Останнє вимагає докладного знання особливостей їхньої електронної структури, яка є основою для розрахунку й розуміння електричних, оптичних та термодинамічних властивостей. Саме уміння розраховувати електронну структуру та оптичні характеристики напівпровідникових сплавів є важливою передумовою аналізу фізичних явищ, що спостерігаються як у вказаних матеріалах, так і в приладах на їх основі.

II. МЕТОДИКА РОЗРАХУНКУ

Метод локального модельного псевдопотенціалу, який ми використали, порівняно з традиційними методами емпіричних псевдопотенціалів коректніше відображає електронні характеристики різноманітних напівпровідникових структур. У базисі плоских хвиль секулярна задача має вигляд [21] :

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

де \mathbf{G}, \mathbf{G}' — вектори оберненої ґратки. Перший член відповідає кінетичній енергії, другий — локальному модельному псевдопотенціалові $V_{\text{ps}}(|\mathbf{G} - \mathbf{G}'|)$, третій — спин-орбітальній взаємодії,

$$V_{\text{SO}}^{SS'}(\mathbf{G}, \mathbf{G}') = (\mathbf{G} \times \mathbf{G}') \sigma_{S,S'} \left\{ -i\lambda^S \cos(\mathbf{G} - \mathbf{G}')\tau + \lambda^A \sin(\mathbf{G} - \mathbf{G}')\tau \right\}, \quad (2)$$

де S та S' — спінові стани, $\tau = (a/8)[1,1,1]$, a — постійна ґратка, σ — матриця Паулі, λ^S, λ^A — параметри спин-орбітальної взаємодії.

Урахуємо локальні деформації, що виникають у сплаві, доповнивши атомний псевдопотенціал $v_\alpha(\mathbf{G})$ множником $[1 + \delta v_\alpha(\varepsilon)]$ [22], тоді

$$V_{\text{PS}}(\mathbf{G}, \varepsilon) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\alpha,n} \{v_\alpha(|\mathbf{G}|)[1 + \delta v_\alpha(\varepsilon)]\} \exp(i\mathbf{G}\mathbf{R}_{\alpha,n}), \quad (3)$$

де ε — відносна локальна деформація, Ω — об'єм елементарної комірки, $\mathbf{R}_{\alpha,n}$ — положення n -го атома сорту α в елементарній комірці.

У лінійному за деформацією наближенні

$$\delta v_\alpha(\varepsilon) = \sum_{ij} a_{ij} \varepsilon_{ij}. \quad (4)$$

Для структури алмазу виконуються умови $a_{xx} = a_{yy} = a_{zz}, a_{ij} = 0$ при $i \neq j$.

Тоді (4) набере вигляду

$$\delta v_\alpha(\varepsilon) \propto \text{Sp}(\varepsilon). \quad (5)$$

Вибір функціональної форми екранованого псевдопотенціалу диктується умовою достатньої його гнучкості при описі якомога більшої кількості фізичних характеристик. При цьому кількість параметрів псевдопотенціалу має бути в розумних межах, а самі параметри не повинні значно змінюватись при оптимізації електронної структури. Виберемо псевдопотенціал у формі [23]:

$$v_\alpha(\mathbf{G}) = a_{0\alpha} \frac{(G^2 - a_{1\alpha})}{a_{2\alpha} \exp(a_{3\alpha} G^2) - 1}, \quad (6)$$

і

$$\delta v_\alpha(\varepsilon) = a_{4\alpha} \text{Sp}(\varepsilon). \quad (7)$$

Вплив температури на зонну структуру досліджуваних твердих розчинів урахували за допомогою теорії Брукса-Ю [21].

Залежності постійних ґратки від концентрацій компонент у сплавах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ ми розраховували раніше за допомогою методу молекулярної динаміки [24] і взяли до уваги при розрахунку зонної структури досліджуваних твердих розчинів. Позиційну неупорядкованість, яка пов'язана з локальною зміною положення атомів у релаксованому кристалі і приводить до локальних деформацій, ми враховували з допомогою поправки (7) у псевдопотенціалі.

Композиційну неупорядкованість, що виникає при утворенні сплавів заміщення, ми взяли до уваги на

основі [25]. Нехай атоми в ідеальному твердому розчині A_xB_{1-x} займають положення \mathbf{R}_j . Унаслідок композиційної неупорядкованості періодичний псевдопотенціал потрібно доповнити неперіодичним доданком V_R :

$$V(\mathbf{r}) = V_{ps}(\mathbf{r}) + V_R(\mathbf{r}), \quad (8)$$

де

$$V_R(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{N^3} a_j \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (9)$$

$a_j = 1 - x$, якщо в положенні \mathbf{R}_j перебуває атом А, та $a_j = -x$, якщо в положенні \mathbf{R}_j є атом В, Δ — різниця псевдопотенціалів атомів А і В. Враховуючи те, що різниця потенціалів Δ є набагато меншою за самі атомні потенціали, вплив ефектів композиційного розупорядкування можна вивчити, використовуючи теорію збурень. У першому порядку теорії збурень усереднені флюктуації композиційної неупорядкованості дають нульовий внесок, тому в другому порядку теорії збурень енергетичні стани системи при наявності композиційної неупорядкованості можна виразити [25] так:

$$E_n(\mathbf{k}, x) = E_n^{(0)}(\mathbf{k}, x) + x(1-x)N^3 \sum_{n',k'} \frac{|\langle n, \mathbf{k}, x | \Delta | n', \mathbf{k}', x \rangle|^2}{E_n^{(0)}(\mathbf{k}, x) - E_{n'}^{(0)}(\mathbf{k}', x)}, \quad (10)$$

де енергії $E_n^{(0)}(\mathbf{k}, x)$ знайдені в наближенні віртуального кристала. При цьому припускаємо, що атоми А і В розподілені хаотично по вузлах ґратки, що відповідає ідеальному гомогенному сплаву, тобто виключається можливість кластеризації. Крім цього, в рівнянні (10) сумування йде за всіма можливими станами віртуального кристала. Отже, ми врахували два сплавні ефекти: композиційну та позиційну неупорядкованість при моделюванні зонної структури напівпровідникових розчинів.

Основною метою нашої роботи є дослідити оптичні властивості подвійних твердих розчинів заміщення $Si_{1-x}C_x$, $Ge_{1-x}Si_x$, $Ge_{1-x}Sn_x$, $Si_{1-x}Sn_x$. Відомо, що електронна зонна структура безпосередньо пов'язана з комплексною діелектричною функцією $\varepsilon(E) = \varepsilon_1(E) + i\varepsilon_2(E)$. Знання комплексної діелектричної функції дає змогу відшукати інші оптичні характеристики, зокрема показник заломлення середовища (n), коефіцієнт поглинання (α), коефіцієнт відбивання (R) та інші. Уявна частина діелектричної функції [21]:

$$\varepsilon_2(E) = \frac{4\pi^2\hbar^2e^2}{m^2E^2} \sum_{vc} \int_{\text{ЗБ}} \frac{2d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \cdot |\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{VC}(\mathbf{k})|^2 \cdot \delta(E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - E), \quad (11)$$

де

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{VC}(\mathbf{k}) = \langle \psi_{ck} | \mathbf{e} \mathbf{p} | \psi_{vk} \rangle, \quad (12)$$

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

Сумували по станах валентних зон (v) і зон провідності (c). При підсумовуванні було враховано вісім верхніх валентних зон і чотири нижні зони провідності. Інтегрування проводили за першою зоною Бріллюена методом тетраєдрів [26], причому зона Бріллюена була розділена на 3000 рівновеликих тетраєдрів. Матричні елементи (12) розраховували на отриманих власних псевдохвильових функціях і контролювали за допомогою правил відбору. При розрахунку $\varepsilon_2(E)$ екситонних ефектів не враховували. Дійсну частину діелектричної функції знаходили з розв'язку інтегральних співвідношень Крамерса-Кроніґа.

III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

Процедура знаходження атомних псевдопотенціалів зводилася до розрахунку рівноважної електронної

структури елементарних напівпровідників С, Si, Ge та Sn. Після цього коефіцієнти a_4 вибирали так, щоб узгодити розраховані значення гідростатичних деформаційних потенціалів забороненої зони з експериментальними [27]. У таблиці 1 наведено значення псевдопотенціальних параметрів a_0 , a_1 , a_2 , a_3 , a_4 , а також λ^S , λ^A . Розраховані енергетичні міжзонні віддалі для С, Si, Ge та Sn у деяких високосиметричних точках зони Бріллюена в порівнянні з експериментальними значеннями наведено в таблиці 2.

Параметр	α -C	Si	Ge	α -Sn
a_0 , eB	1.03	0.912	0.4865	0.38
a_1 , $4\pi^2/a^2$	8.053	4.85	6.74	8.3
a_2	3.93	2.98	4.414	4.397
a_3 , $4\pi^2/a^2$	0.11	0.327	0.226	0.146
a_4	1.2	1.6	0.8	2.255
λ^S , eB	0.00001	0.00024	0.0011	0.003
λ^A , eB	0.000016	0.00028	0.00012	0.003

Примітка: a — постійна ґратки.

Таблиця 1. Псевдопотенціальні параметри.

Параметр	α -C		Si		Ge		α -Sn	
	Наші дані	Експ.	Наші дані	Експ.	Наші дані	Експ.	Наші дані	Експ.
$\Gamma_{15} \rightarrow \Gamma_{25'}$	7.19	7.2 [28]	2.994	3.4 [28]	0.83	0.8 [28]	0.012	0[28]
$X_1 \rightarrow X_4$	12.3	12.5 [28]	3.22	—	1.758	2.1 [28]	0.73	1.4 [28]
$L_1 \rightarrow L_{3'}$	12.5	12.5 [28]	4.27	—	4.3	4.3 [28]	3.56	3.6 [28]
$L_1 \rightarrow \Gamma_{25'}$	10.9	—	2.01	2 [28]	0.661	0.66 [28]	0.2	0.3 [28]
$X_1 \rightarrow \Gamma_{25'}$	12.7	—	1.097	1.2 [28]	1.21	1.2 [28]	2.335	—
a_g	-3.9	-3.8 [27]	-1.98	-1.8 [27]	-2.3	-2.1 [27]	-0.04	-0.03 [28]

Таблиця 2. Енергії міжзонних переходів (в еВ) у деяких високосиметричних точках зони Бріллюена та деформаційні потенціали.

На рис. 1 показано уявну частину діелектричної функції для елементарних Si та Ge у порівнянні з експериментальними даними [29]. У структурі $\epsilon_2(E)$ для Si та Ge можна виділити такі особливості: край поглинання E_0 починається з 0.793 еВ для Ge та 1.189 еВ для Si, за що відповідають переходи $\Gamma_{25'} \rightarrow \Gamma_2$. Далі у випадку Ge ми спостерігаємо спін-орбітально розщеплені піки E_1 та $E_1 + \Delta_1$ при енергіях 2.08 еВ та 2.278 еВ відповідно. Подібне розщеплення спостерігали експериментально [30] з енергіями піків відповідно 2.2 та 2.4 еВ. На вказаній експериментальній залежності (рис. 1) [29] розщеплення не спостерігаємо у зв'язку з великим кроком вимірювань. Водночас узгодження положень отриманих піків E_1 та $E_1 + \Delta_1$ з експериментальним значенням [29] є задовільним. Для Si ми одержали нерозщеплений пік E_1 з енергією 3.387 еВ, що добре узгоджується з експериментальним піком E_1 [29] 3.4 еВ. У високоенергетичній ділянці отримані критичні точки $E_2(X_4 \rightarrow X_1, \Sigma_4 \rightarrow \Sigma_1)$ для Ge та Si відповідають 4.159 еВ та 4.3 еВ, тоді як експериментальні значення 4.2 еВ та 4.357 еВ [29]. Одержані дані для уявної частини діелектричної функції Si та Ge дають змогу перейти безпосередньо до розрахунку оптичних властивостей твердого розчину $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$.

На рис. 2 зображено розраховану концентраційну залежність піків E_1 та E_2 для об'ємного та біак-

сіально деформованого твердого розчину заміщення $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ у порівнянні з експериментальними даними [29]. На залежності $E_g(x)$ (рис. 2) навели точку кросоверу при $x_c = 0.19$, яка утворена зміною типу переходу в забороненій зоні з $\Gamma_8^V - X_5^C$ на $\Gamma_8^V - L_6^C$ (виміряне значення $x_c = 0.15$ [31]) і проявляється в різкій зміні характеру поведінки $E_g(x)$. Нелінійна залежність $E_1(x)$ в ділянці концентрацій $x = 0.4 - 0.8$ підтверджується експериментально [29]. При накладанні біаксіальних деформацій отримано її посилення. Концентраційна залежність піка E_2 в наших розрахунках має, на відміну від експерименту [29], нелінійну поведінку з чітко вираженим мінімумом при $x = 0.4$.

Слід відзначити, що вплив позиційної неупорядкованості на діелектричну функцію сплаву $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ становить $\sim 5-6\%$ для обох піків E_1 та E_2 і приводить до їх зсуву в низькоенергетичну ділянку. Вплив композиційної неупорядкованості в цьому випадку виявився незначним ($\leq 1\%$), однак з його допомогою вдається пояснити прогин композиційної залежності забороненої зони у сплаві.

На рис. 3 показали $E_1(x)$ та $E_2(x)$ для об'ємного $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ та біаксіально деформованого $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}$ сплаву. На цьому ж рисунку наведено експериментальні дані з міжзонних переходів $\Gamma_{25'} \rightarrow L_1$ та $\Gamma_{25'} \rightarrow \Gamma_{15'}$ для $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}$ [32] у порівнянні з нашим роз-

рахунком $E_g(x)$ для $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}$. Отримана точка кросоверу $x_C = 0.1$, що відповідає за зміну типу переходу $\Gamma_{25'} \rightarrow L_1$ на $\Gamma_{25'} \rightarrow \Gamma_{15'}$, підтверджується експериментально ($x_C = 0.11$ [32]). Вплив позиційної неупорядкованості у сплаві $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ є істотнішим порівняно з $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ і становить близько 20% для обох піків E_1 та E_2 . Композиційна неупорядкованість при низьких концентраціях Sn є незначною і становить не більше 2%. Біаксіальна деформація спричиняє зсув у низькоенергетичну ділянку основних піків діелектричної функції, а також веде до майже лінійних залежностей $E_1(x)$ та $E_2(x)$.

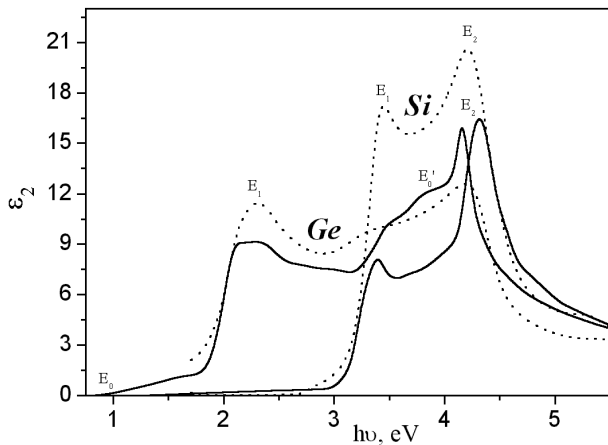


Рис. 1. Уявна частина діелектричної функції Ge та Si ($T = 300\text{ K}$): суцільні лінії — наші розрахунки; пунктирні — експериментальні дані [29].

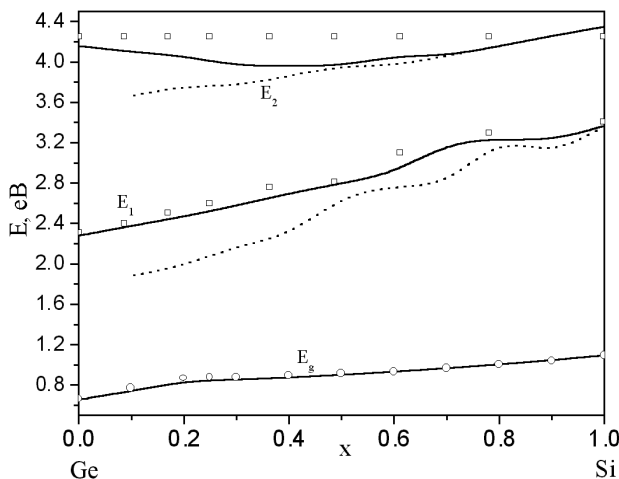


Рис. 2. Концентраційна залежність піків E_1 , E_2 та ширини забороненої зони E_g для об'ємного $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ та біаксіально деформованого $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$ сплавів: суцільна крива — $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$; пунктирна крива — $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$; квадратні точки — експеримент [29]; круглі точки — експеримент [31].

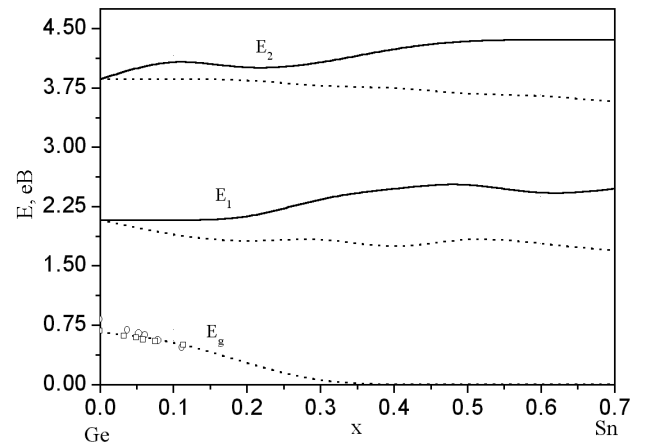


Рис. 3. Концентраційна залежність піків E_1 , E_2 та ширини забороненої зони E_g для об'ємного $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ та біаксіально деформованого $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}$ сплавів: суцільна крива — $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$; пунктирна крива — $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}$; круглі точки — експериментальні дані переходу $\Gamma_{25'} \rightarrow \Gamma_{15'}$ для $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}$ [32]; квадратні точки — експериментальні дані переходу $\Gamma_{25'} \rightarrow L_1$ для $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}$ [32].

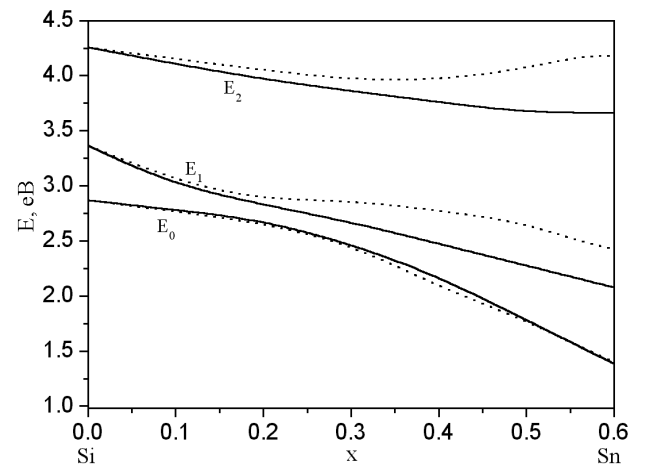


Рис. 4. Концентраційна залежність піків E_0 , E_1 та E_2 для об'ємного $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$ та біаксіально деформованого $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$ сплавів: суцільна крива — $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$; пунктирна крива — $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$.

На відміну від двох попередніх твердих розчинів $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ та $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ для $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$ при накладанні на сплав біаксіальних деформацій ми отримали зростання енергії оптичних піків E_1 та E_2 порівняно з об'ємним сплавом, а для E_0 — незначне пониження (рис. 4). Це можна пояснити значною відмінністю деформаційних потенціалів різних енергетичних зон Si та Sn. Вплив позиційної неупорядкованості на по-

ложення E_1 та E_2 для твердого розчину $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$ не перевищує 29% та проявляється у зміні положення піків. Для E_0 вказаний вплив є відносно незначним та становить $\sim 5\%$.

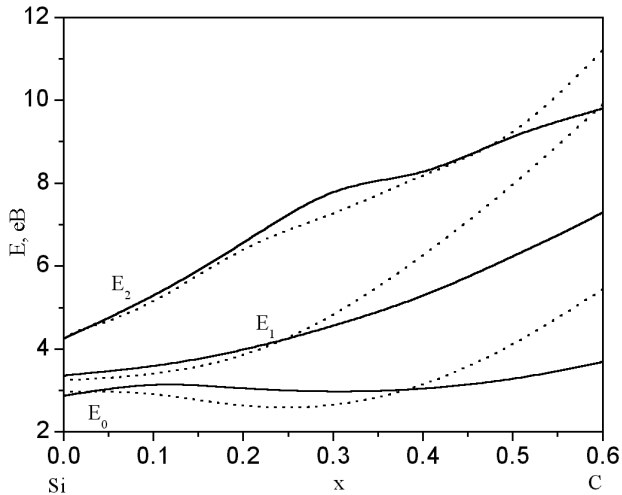


Рис. 5. Концентраційна залежність піків E_0 , E_1 та E_2 для об'ємного $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ та біаксіально деформованого $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x/\text{Si}$ сплаву: суцільна крива — $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$; пунктирна крива — $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x/\text{Si}$.

Концентраційну залежність оптичних піків E_0 , E_1 , E_2 уявної частини діелектричної функції для об'ємного $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ та біаксіально деформованого $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x/\text{Si}$ ми показали на рис. 5. Як видно, характер залежностей є складним, що в цілому пояснюється складною поведінкою енергій міжзонних переходів у високосиметричних точках зони Бріллюена (наявність двох точок кросоверу) та значним впливом ґраткових неузгодженостей у сплаві $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ ($\sim 41\%$). Слід відзначити, що біаксіальна деформація сплаву на підкладці Si приводить до збільшення постійної ґратки сплаву в площині росту, на відміну від $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Ge}$ та $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x/\text{Si}$, де є деформація стиску. Це спричиняє пониження енергетичних положень оптичних піків E_1 та E_2 . Вплив позиційної неупорядкованості для $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ виявився найбільшим порівняно з попередніми сплавами і не перевищує 35%. Експериментальні виміряні залежності $E_1(x)$, $E_2(x)$ для тонкої псевдоморфної плівки $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x/\text{Si}$ [33] в ділянці $0 \leq x \leq 0.02$ наведені на рис. 6 у порівнянні з залежностями, які ми розраховували. Врахування механізму позиційної неупорядкованості на основі молекулярно-динамічного моделювання [24] зумовлює прогин залежності $E_2(x)$, що пояснює експериментально отриману поведінку [20]. Неврахування зазначеного механізму не дозволило авторам праці [20] коректно пояснити пониження положень піків E_1 та E_2 в ділянці малих x . Слід відзначити надзвичайно

складну природу утворення сплаву $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$, особливо в ділянці малих концентрацій компоненти C, де вдається отримувати цей матеріал. Велика різниця в розмірах атомів Si та C приводить до того, що вирощування $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ супроводжується переходами атомів у міжвузля. Це своєю чергою спричиняє значні труднощі в передбаченні властивостей цих сплавів. Як показали наші дослідження, такі труднощі деякою мірою вдається обійти лише комплексним поєднанням різних теоретичних методів дослідження, зокрема методу молекулярної динаміки та псевдопотенціалу.

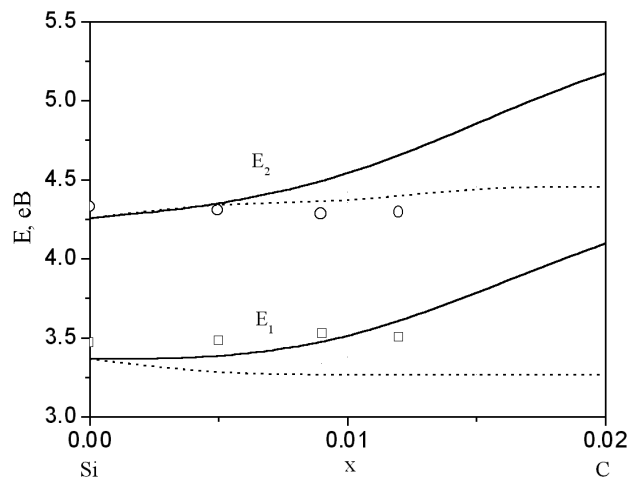


Рис. 6. Концентраційна залежність піків E_0 , E_1 та E_2 для об'ємного $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ та біаксіально деформованого $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x/\text{Si}$ сплаву: суцільна крива — $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$; пунктирна крива — $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x/\text{Si}$; круглі точки — експеримент E_2 [33]; квадратні точки — експеримент E_1 [33].

IV. ВИСНОВКИ

У статті на основі отриманої методом локального модельного псевдопотенціалу енергетичної структури розраховано діелектричну функцію алмазоподібних твердих розчинів заміщення $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$. Показано, що врахування позиційної неупорядкованості атомів у сплавах приводить до зсуву положень оптичних піків E_1 та E_2 в низькоенергетичну ділянку. Вплив композиційної неупорядкованості є незначним і проявляється у збільшенні прогину концентраційних залежностей $E_1(x)$ та $E_2(x)$. Врахування біаксіальних деформацій у відповідних псевдоморфних плівках дало змогу пояснити наявні експериментальні залежності їхніх оптичних характеристик. Наші розрахунки систематизують у цілому картину фізичних властивостей розглянутих подвійних сплавів на основі елементів IV групи і проведені в дусі робіт з дослідження широко вивченого як теоретично, так і експериментально $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ [34, 35].

- [1] Ф. Ф. Сизов, Ю. Н. Козырев, В. П. Кладько *и др.*, Физ. техн. полупр. **31**, 922 (1997).
- [2] V. G. Deibuk, Yu. G. Korolyuk, *Semiconductors* **5**, 459(2002).
- [3] S. C. Jain, *Germanium-Silicon Strained Layers and Heterostructures* (Acad. Press, Boston, 1994).
- [4] R. People, J. Bean, *Appl. Phys. Lett.* **45**, 1231 (1984).
- [5] C. Walle, R. Martin, *Phys. Rev. B* **34**, 5621 (1986).
- [6] D. C. Ahlgren, M. Gilbert, D. Greenberg, *et al.*, *Tech. Dig. Int. Elec. Dev. Mtg.*, 859 (1996).
- [7] S. Luryi, T. P. Parasall, H. Temkin, J. C. Bean, *IEEE Elec. Dev. Lett.* **EDL-7**, 104 (1986).
- [8] T. L. Lin, J. Maserjian, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 1422 (1990).
- [9] Q. Mi, X. Xiao, J. C. Sturm, L. Lenchyshyn, M. L. W. Thewalt, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 3177 (1992).
- [10] H. Presting, T. Zinke, A. Splett, H. Kibbel, M. Jaros, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 2376 (1996).
- [11] D. C. Houghton, J.-P. Noel, N. L. Rowell, *Proc. Symp. Mat. Res. Soc.* **220**, 299 (1991).
- [12] C. Van de Walle, *Phys. Rev. B* **34**, 5621 (1986).
- [13] Y. J. Mii, Y. H. Xie, E. A. Fitzegerald, D. Monreoe, F. A. Theil, B. E. Weir, L. C. Feldman, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 1611 (1991).
- [14] K. Ismail, S. Rishton, J. O. Chu, K. Chan, B. S. Meyerson, *IEEE Elec. Dev. Lett.* **14**, 348 (1993).
- [15] E. J. Prinz, P. M. Garone, P. V. Schwartz, X. Xiao, J. C. Sturm, *IEEE Elec. Dev. Lett.* **12**, 42 (1991).
- [16] J. W. Slotboom, B. Streutker, A. Pruijboom, D. J. Gravestijn, *IEEE Elec. Dev. Lett.* **12**, 486 (1991).
- [17] М. Хансен, К. Андерко, *Структура двойных сплавов* (Пер. с англ., Металлургия, Москва, 1962).
- [18] O. Gurdal, P. Desjardins, *J. Appl. Phys.* **83**, 162 (1998).
- [19] A. Khan, P. Berger, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 3105 (1996).
- [20] S. Zollner, *J. Appl. Phys.* **78**, 5209 (1995).
- [21] M. L. Cohen, J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors* (Springer Verlag, Berlin, 1996).
- [22] T. Mattila, L. W. Wang, A. Zunger, *Phys. Rev. B* **59**, 15270 (1999).
- [23] M. Schluter, J. R. Chelikowsky, S. G. Louis, M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **12**, 4200 (1975).
- [24] Ю. Г. Королюк, В. Г. Дейбук, С. В. Мельничук, *Вісн. Чернів. ун-ту. Фізика–Електроніка* **76**, 65 (2002).
- [25] A. Baldereschi, K. Maschke, *Solid State Commun.* **16**, 99 (1975).
- [26] G. Lehmann, M. Taut, *Phys. Status Solidi B* **54**, 469 (1972).
- [27] A. Blacha, H. Presting, M. Cardona, *Phys. Status Solidi B* **126**, 11 (1984).
- [28] В. И. Гавриленко, А. М. Грехов, Д. В. Корбутяк, В. Г. Литовченко, *Оптические свойства полупроводников: Справ.* (Наук. думка, Київ, 1987).
- [29] J. Humlicek, M. Garriga, M. I. Alonso, M. Cardona, *J. Appl. Phys.* **65**, 2827 (1988).
- [30] E. Shmidt, *Phys. Status Solidi* **27**, 57 (1968).
- [31] R. Braunstein, A. R. Moore, F. Herman, *Phys. Rev.* **109**, 695 (1958).
- [32] R. Ragan, S. Kyu, H. Atwater, *Mater. Sci. Eng.* **87**, 204 (2001).
- [33] W. Kissinger, M. Weidner, H. Osten, M. Eichler, *Appl. Phys. Lett.* **65**, 3356 (1994).
- [34] Ch. Van de Walle, R. Martin, *Phys. Rev. B* **8**, 5621 (1986).
- [35] F. Tekia, M. Ferhat, A. Zaoui, *Physica B* **293**, 183 (1999).

OPTICAL PROPERTIES OF DISORDEED DIAMOND-LIKE SOLID SUBSTITUTIONAL SOLUTIONS $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ AND THEIR THIN FILMS

Yu. G. Korolyuk, V. G. Deibuk, Ya. I. Vyklyuk
Chernivtsi State University,
2 Kotsyubinskiy St., Chernivtsi, UA-58012, Ukraine

The electronic structure of bulk and biaxially deformed $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ solid substitutional solutions is calculated using the local model pseudopotential method as well as compositional and positional disorder. The influence of different types of disorder and deformations on the behaviour of dielectric function is explained having been studied experimentally.