УДК 621.315

ОЦЕНКА ОПТИЧЕСКОЙ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ СВЕРХРЕШЕТОК $Si—SiO_2$

Е. А. Виноградов, Г. И. Макаров

Экспериментально получено изменение положения края собственного поглощения сверхрешеток $Si—SiO_2$ при изменении их периода за счет изменения толщины слоев окиси кремния. Показано, что полученные результаты можно объяснить изгибом зон на границе раздела $Si—SiO_2$.

Сверхрешетки как твердотельные структуры, имеющие помимо периодического потенциала кристаллической решетки искусственно созданный дополнительный одномерный потенциал с периодом, большим постоянной решетки, являются сегодня объектом пристального изучения в связи с созданием новых материалов для науки и техники. Рассмотренные в работе сверхрешетки $Si—SiO_2$ обладают рядом свойств, делающих их интересными объектами для исследования как с точки зрения практического применения (сравнительно простой технологический режим напыления), так и научных интересов (в [1] было показано, что при создании этих сверхструктур получается вещество с новыми параметрами кристаллической решетки). Следует отметить, что, с точки зрения традиционной теории сверхрешеток, эта структура не представляет большого интереса [2] вследствие большой величины неопределенности энергии $\hbar/\tau$, связанной с малым временем жизни носителей в кварце. Однако представления эти не совсем соответствуют действительности, так как это существенно иные системы, требующие отдельного решения уравнения Шредингера, поскольку вся традиционная теория сверхрешеток построена в предположении, что разница в ширинах запрещенных зон материалов сравнительно невелика (например, для сверхрешетки $GaAs—Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ эта разница составляет 300 мэВ [3]), тогда как для структуры $Si—SiO_2$ она составляет около 7 эВ. Целью проведенной работы являлось изучение изменения оптической ширины запрещенной зоны сверхрешеток $Si—SiO_2$ при изменении их периода за счет изменения толщины слоев окиси кремния путем анализа спектров отражения образцов в видимой области.

Для исследования использовались образцы сверхрешеток $Si—SiO_2$, полученные магнетронным распылением на установке «Sputron-2» [4]. Сведения об образцах приведены в таблице. Сами сверхрешетки представляли собой периодические структуры из 40 пар слоев $Si—SiO_2$. Слои кремния и кварца делались аморфными. В качестве подложки использовался плавленый кварц диаметром 20 и толщиной 2.2 мм.

Спектры отражения образцов регистрировались в видимой области спектра 0.4—0.8 мкм при угле падения света, близком к нормальному (рис. 1, *а*, *б*). Измерения проводились на многоканальном анализаторе спектра ОМА-2 с гониометрической приставкой на основе ГУР-5 и спектрофотометре ИКСМ-2. Для того чтобы выяснить, являются изменения спектров чисто интерференционными или же свидетельствуют о сдвиге края собственного поглощения при изменении периода сверхструктуры, были проведены расчеты спектров отражения на ЭВМ. При этом использовалась следующая модель.

1. При помощи принципа аддитивности рефракции [5], который был ранее успешно применен для расчета оптических констант в гранулярной фазе [6] и в растворах [7], рассчитывался эффективный комплексный показатель преломления n_* одного периода сверхрешетки как парциальная величина, пропорциональная показателю преломления каждого слоя, взятому с весом в долю его толщины от общей величины периода

$$\frac{n_*^2-1}{n_*^2+2}=\frac{n_1^2-1}{n_1^2+2}\,\frac{d_1}{d_1+d_2}+\frac{n_2^2-1}{n_2^2+2}\,\frac{d_2}{d_1+d_2}, \tag{1}$$

где n_1, n_2 — комплексные показатели преломления кремния и кварца соответственно.

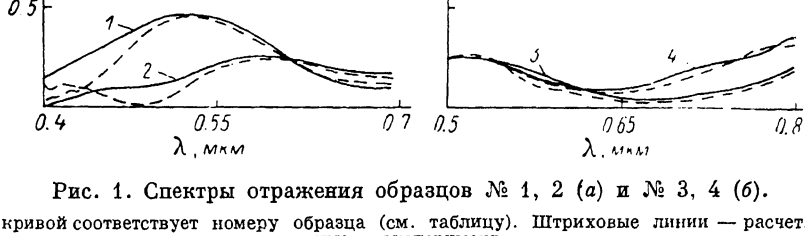

Рис. 1. Спектры отражения образцов № 1, 2 (*а*) и № 3, 4 (*б*).

Номер кривой соответствует номеру образца (см. таблицу). Штриховые линии — расчет, сплошные — эксперимент.

2. Рассматривалась задача расчета отражения от слоя с вычисленным эффективным показателем преломления и толщиной, равной совокупной толщине всех слоев сверхрешетки на подложке из кварца

$$R=\frac{r_{01}+r_{12}e^{-2ik_{1z}d}}{1+r_{01}r_{12}e^{-2ik_{1z}d}}\,e^{-2ik_{0z}d}. \tag{2}$$

Здесь r_{12}, r_{01} — отражения от границ раздела сверхрешетки с подложкой и воздухом; d — толщина сверхрешетки; k_{0z}, k_{1z} — компоненты волновых векторов света в воздухе и в сверхрешетке.

Параметры образцов и результаты расчета оптической ширины запрещенной зоны сверхрешеток Si—SiO_2

№ образца	d_1, Å	d_2, Å	ω_{01}, см$^{-1}$	E_0, эВ	E_0-E_g, эВ
1	11	20	14800	1.84	0.97
2	11	30	13500	1.67	0.80
3	11	15	10350	1.28	0.41
4	11	10	11350	1.41	0.54

3. Показатель преломления кварца считался известным в рассматриваемой области спектра и не зависящим от периода сверхструктуры (вследствие его широкой запрещенной зоны), а показатель преломления n_1 определялся из осцилляторной модели

$$n_1^2=1+\sum_{j=1}^{M}\frac{Q_j\omega_{0j}^2}{\omega_{0j}^2-\omega^2+iG_j\omega}. \tag{3}$$

Величины Q_j, ω_{0j}, G_j в данной модели являлись подгоночными параметрами. Для образцов № 1, 2 применялась одноосцилляторная модель, а для образцов № 3, 4 двухосцилляторная модель. Из полученной величины ω_{01} определялось положение края собственного поглощения. Расчетные спектры приведены на рис. 1, *а*, *б*. Их отличие от экспериментальных спектров образцов № 1, 2 в области коротких волн, достаточно удаленных от края собственного поглощения, объясняется тем, что там вступают в действие дополнительные переходы и одноосцилляторная модель не является адекватной, что, однако, не мешает оценить величину края собственного поглощения.

Результаты оценки края собственного поглощения сверхструктур приведены в таблице. Величина запрещенной зоны аморфного кремния E_g

принималась равной 0.87 эВ. Как видно из таблицы, изменение оптической ширины запрещенной зоны получилось немонотонным по толщине слоев окиси кремния при постоянной толщине слоев кремния. Если исходить из модели прямоугольного потенциала Кронига—Пенни, то изменение E_g должно быть монотонным. Поэтому можно предположить, что распределение потенциала в исследуемой сверхструктуре имеет непрямоугольную форму. Покажем на простой, имеющей аналитическое решение, модели, что полученные результаты можно объяснить изгибом зон на границе раздела $Si—SiO_2$ [8]. В этом случае потенциал можно записать в следующем виде:

$$V = V_0 \csc^2 (\pi z/a), \quad a = d_1 + d_2, \tag{4}$$

d_2 — толщина слоя диэлектрика, d_1 — толщина слоя полупроводника.

Решение задачи подобного типа было предложено в [9]. В случае слабого взаимодействия между слоями полупроводника в сверхрешетке

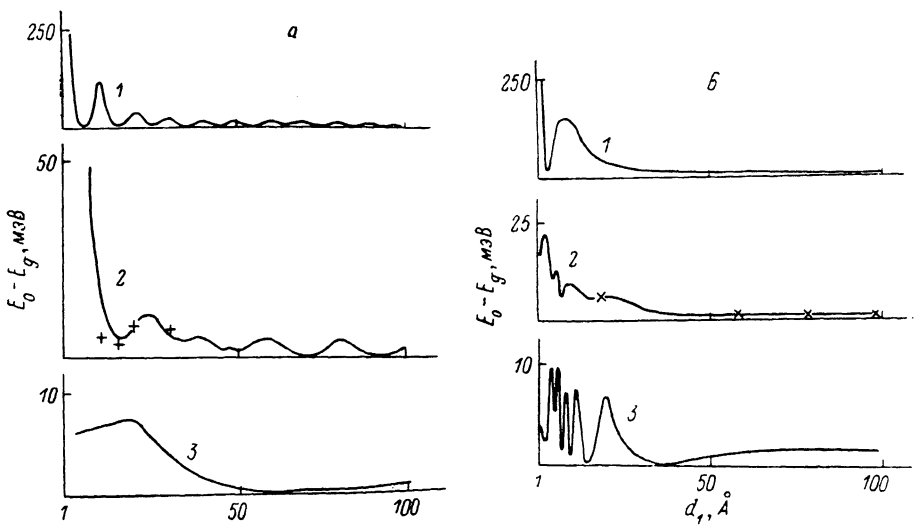

Рис. 2. Изменение ширины запрещенной зоны сверхрешетки полупроводник/диэлектрик при изменении толщины слоя диэлектрика (*а*) и полупроводника (*б*).

Сплошные линии — расчет, точки — эксперимент. *а*: *1* — d_1=5, *2* — 11, *3* — 50 Å; *б*: *1* — 5, *2* — 25, *3* — 50 Å.

зонная структура определяется в основном размерным квантованием и выражение для V_0 можно представить в следующем виде:

$$V_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_*} + \frac{\hbar^2 \pi^2 (j+1)^2}{2m_* d_1^2}, \tag{5}$$

k — волновое число, m_* — эффективная масса электрона в полупроводнике, j — номер уровня размерного квантования полупроводника.

Таким образом, энергетическая структура исходного массивного полупроводника испытывает следующую трансформацию: собственные уровни энергии, соответствующие массивному образцу, расщепляются за счет размерного квантования (тонкая пленка полупроводника), а каждый из полученных уровней расщепляется в свою очередь за счет создания искусственной периодичности при чередовании этих слоев с диэлектрическими. Таким образом, в данной модели сверхрешетки полупроводник/диэлектрик энергетические зоны имеют следующую структуру:

$$E_{nj}(k) = \hbar^2 \{\arccos[\sin(\pi s)\cos(k(d_1+d_2))]\}^2 / 2m_* (d_1+d_2)^2,$$

$$S = \sqrt{\frac{k^2 (d_1+d_2)^2}{\pi^2} + \frac{(d_1+d_2)^2 (j+1)^2}{d_1^2} + \frac{1}{4}}. \tag{6}$$

Здесь n — число периодов косинуса, n=0, 1,. . . .

Как видно из выражения (6), в рассматриваемых сверхрешетках существует периодичность энергетической структуры как по k (обычная расширенная зона Бриллюэна), так и по параметру S, величина которого определяется в основном геометрическими размерами структуры (d_1 и d_2). Результаты расчета $E_{00}(0)=E_0-E_g$, где E_g, E_0 — ширины запрещенной зоны массивного полупроводника и сверхструктуры соответственно, при различных толщинах слоев d_1 и d_2 приведены на рис. 2, *а*, *б*.

Величина E_0-E_g из таблицы, приведенная к общему масштабу, показана на рис. 2, *а*. Как видно из рисунка, рассмотренная выше модель качественно хорошо описывает полученные результаты, а имеющиеся количественные расхождения объясняются незнанием исходных параметров (эффективной массы и волнового вектора), а также приближенностью самой модели, рассчитанной на идеальный изолятор. На рис. 2, *б* отражены результаты оценки края собственного поглощения сверхрешеток $Si-SiO_2$ при изменении толщины слоя полупроводника, полученные ранее [4]. Видно, что рассматриваемая модель достаточно хорошо работает и в этом случае.

В заключение авторы выражают свою благодарность Ф. А. Пудонину за предоставленные образцы сверхрешеток.

Список литературы

[1] Плотников А. Ф., Пудонин Ф. А., Стопачинский В. Б. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 46. № 11. С. 443—446.
[2] Шик А. Я. // ФТП. 1974. Т. 8. № 10. С. 1841—1864.
[3] Силин А. П. // УФН. 1985. Т. 147. № 3. С. 485—521.
[4] Крюков С. А., Плотников А. Ф., Пудонин Ф. А., Стопачинский В. Б. // Кр. сообщ. по физике. 1986. № 5. С. 34—37.
[5] Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973. 719 с.
[6] Золотарев В. М. // ЖПС. 1972. Т. 17. № 6. С. 1052—1057.
[7] Золотарев В. М. // Опт. и спектр. 1972. Т. 32. № 5. С. 974—978.
[8] Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Кн. 1. М.: Мир, 1984. 456 с.
[9] Scarf F. L. // Phys. Rev. 1958. V. 112. N 4. P. 1137—1140.

Физический институт
им. П. Н. Лебедева АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
17 апреля 1989 г.