

О фотоупругости и квадратичной диэлектрической восприимчивости широкозонных полупроводников

© С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 1 ноября 1996 г. Принята к печати 14 ноября 1996 г.)

На основании аналогии между фотоупругими и упругими свойствами полупроводниковых кристаллов получены выражения для модулей фотоупругости. Расчет проделан для широкозонных полупроводников (карбида кремния и нитридов бора, алюминия и галлия) со структурой как сфалерита, так и вюрцита. Также рассчитана квадратичная диэлектрическая восприимчивость для гексагональных структур.

Несмотря на предпринятые в последние годы интенсивные исследования широкозонных полупроводников [1], экспериментальная информация об их оптических свойствах крайне скудна. Поэтому теоретические оценки тех или иных характеристик (пусть даже грубые) представляют несомненный интерес. В работе [2] Филлипс на основании своей диэлектрической модели [3] выдвинул предположение о том, что фотоупругие свойства полупроводников можно описать по аналогии с их упругими свойствами. Воспользовавшись хорошо зарекомендовавшей себя эмпирической моделью упругости Китинга [4,5] и предложив соответствие между фотоупругими (p_{ij}) упругими (c_{ij}) модулями, Филлипс проанализировал выполнение соотношения для кубических кристаллов

$$2p_{44}(p_{11} + p_{12}) = (p_{11} - p_{12})(p_{11} + 3p_{12}), \quad (1)$$

являющегося точным аналогом выражения, связывающего упругие модули c_{ij} . Проверка формулы (1) для алмаза показала, что соотношение выполняется с точностью до 16%. В настоящей работе мы используем эту аналогию для оценки p_{ij} карбида кремния и нитридов бора, алюминия и галлия.

В работах [6,7] было получено следующее соотношение:

$$p_{11} + 2p_{12} = -\eta(\varepsilon_\infty - 1)/\varepsilon_\infty^2, \quad (2)$$

где $\eta = 2 - 6\alpha_p^2$. Здесь ε_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, α_p — полярность кристалла по Харрисону [8–10]. Если сопоставить $(p_{11} + 2p_{12})/3$ с объемным модулем сжатия $B = (c_{11} + 2c_{12})/3$, $(p_{11} - p_{12})/2$ — с модулем сдвига $C_s = (c_{11} - c_{12})/2$, p_{44} — с c_{44} и воспользоваться соотношениями упругих модулей, полученными в модели Китинга–Харрисона [11], то найдем

$$\begin{aligned} p_{11} &= -\frac{1}{3}\eta k \left(1 + \frac{8\lambda}{8 + \lambda}\right) \frac{\varepsilon_\infty - 1}{\varepsilon_\infty^2}, \\ p_{12} &= -\frac{1}{3}\eta k \left(1 - \frac{4\lambda}{8 + \lambda}\right) \frac{\varepsilon_\infty - 1}{\varepsilon_\infty^2}, \\ p_{44} &= -\eta k \frac{33\lambda}{(8 + \lambda)(8 + 3\lambda)} \frac{\varepsilon_\infty - 1}{\varepsilon_\infty^2}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\lambda = 0.85$ — безразмерный параметр [8,9], k — безразмерный коэффициент. Отсюда, в частности, сразу же следует, что $p_{12} = 0.35p_{11}$, $p_{44} = 0.51p_{11}$. По данным работы [12], для алмаза $p_{11} = -0.38$, $p_{12} = -0.09$, $p_{44} = -0.17$. Это приводит к следующим соотношениям: $p_{12}/p_{11} = 0.23$, $p_{44}/p_{11} = 0.45$. Следовательно, соотношения (3) могут служить для предварительной оценки фотоупругих постоянных. При $k = 2$ из формул (3) получаем: $p_{11} = -0.34$, $p_{12} = -0.12$, $p_{44} = -0.18$, что хорошо согласуется с экспериментом. Отметим, однако, что экспериментальные данные противоречивы. Так, например, в [13] для алмаза приводятся следующие данные: $p_{11} = -0.31$, $p_{12} = -0.12$, $p_{44} = 0.09$.

Результаты расчета фотоупругих постоянных для широкозонных полупроводников кубической структуры представлены в табл. 1. Полярности α_p рассчитаны в работе [7], экспериментальные значения ε_∞ взяты из работ [8,14]. Из таблицы, в частности, следует, что p_{ij} карбида кремния и нитрида бора согласуются с p_{ij} для алмаза как по знаку, так и по порядку величины. Для соединений с более высокой степенью ионности, т.е. для нитрида алюминия и галлия, фотоупругие постоянные на порядок меньше и положительны. Вообще говоря, соотношение (1) для c_{ij} получено Китингом для полупроводников IV группы и несколько видоизменяется при переходе к гетерополярным соединениям [15]. Здесь, однако, мы этим обстоятельством пренебрегаем.

В табл. 2 представлены фотоупругие постоянные для гексагональной модификации (структура вюрцита), пересчитанные из модулей для сфалеритной структуры в соответствии с теорией Мартина [16] (см. поправки к этой

Таблица 1. Фотоупругие постоянные p_{ij} для полупроводниковых кристаллов со структурой сфалерита

Кристалл	SiC	BN	AlN	GaN
α_p	0.26	0.34	0.59	0.60
ε_∞	6.5	4.5	4.8	5.8
p_{11}	-24.5	-26.7	1.7	2.7
p_{12}	-8.5	-9.3	0.6	0.9
p_{44}	-12.5	-13.6	0.9	1.4

Примечание. Значения p_{ij} увеличены в 10^2 раз.

Таблица 2. Фотоупругие постоянные p_{ij} для полупроводниковых кристаллов со структурой вюрцита

Кристалл	SiC	BN	AlN	GaN
p_{11}	-28.9	-31.4	2.0	3.1
p_{33}	-30.5	-33.1	2.2	3.3
p_{12}	-7.2	-7.4	0.5	0.8
p_{13}	-5.5	-6.0	0.4	0.6
p_{44}	-28.1	-30.5	0.7	1.0
p_{66}	-10.4	-11.8	0.7	1.2

Примечание. Значения p_{ij} увеличены в 10^2 раз.

Таблица 3. Билинейная диэлектрическая восприимчивость X_{ij}

Кристалл	SiC	BN	AlN	GaN
X_{14}	0.27	0.29	2.31	2.63
X_{33}	0.31	0.33	2.67	3.04
$X_{31} = X_{15}$	-0.16	-0.17	-1.33	-1.52

Примечание. Значения X_{ij} приведены в 10^{-8} ед.СГСЭ.

теории в работах [17,18]). При этом мы пренебрегаем малыми изменениями высокочастотной диэлектрической проницаемости (по данным [19] для карбида кремния различие ϵ_∞ для вюрцитной и сфалеритной структур не превосходит 6%). К сожалению, нам не известны какие-либо экспериментальные данные по фотоупругости гексагональных соединений.

Квадратичная (билинейная) диэлектрическая восприимчивость кубических широкозонных полупроводников X_{14} была рассчитана нами в работе [7]. В кристаллах со структурой вюрцита ($6mm$) имеются три независимые компоненты билинейной восприимчивости: X_{15} , X_{31} и X_{33} . Преобразование, позволяющее найти связь между восприимчивостями кубических и гексагональных структур, получено в работе [20] и имеет вид

$$X_{14} \frac{2}{\sqrt{3}} = X_{33} = -2X_{31} = -2X_{15}.$$

Значения этих восприимчивостей приведены в табл. 3. По данным работы [21] для пленок GaN на сапфире величина X_{33} составляет $2.88 \cdot 10^{-8}$ ед.СГСЭ, что хорошо согласуется с теоретическим значением $3.04 \cdot 10^{-8}$ ед.СГСЭ.

Работа выполнена при частичной поддержке министерства обороны США.

Список литературы

- [1] *Silicon Carbide and Related Materials. Proc. 5th Conf.*, ed. by M.G. Spencer et al. [Inst. Phys. Conf. Ser., N 137 (Bristol-Philadelphia, 1993)].
- [2] J.C. Phillips. *Rev. Mod. Phys.*, **42**, 317 (1970).
- [3] J.C. Phillips. *Phys. Lett.*, **25A**, 727 (1967).
- [4] P.N. Keating. *Phys. Rev. B*, **145**, 637 (1966).
- [5] P.N. Keating. *Phys. Rev. B*, **149**, 674 (1966).
- [6] С.Ю. Давыдов, Е.И. Леонов. *ФТТ*, **30**, 1326 (1988).
- [7] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. *ФТТ*, **37**, 3044 (1995).
- [8] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел* (М., Мир, 1983) т. 1.
- [9] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B*, **24**, 5835 (1981).
- [10] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B*, **27**, 3592 (1983).
- [11] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. *ФТП*, **30**, 683 (1996).
- [12] R.S. Leigh, B. Szigeti. *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A301**, N 1465, 211 (1967).
- [13] Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. *Основы кристаллофизики* (М., Наука, 1975).
- [14] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутях, В.Г. Литовченко. *Оптические свойства полупроводников*. Справочник (Киев, Наук. думка, 1987).
- [15] R.M. Martin. *Phys. Rev. B*, **1**, 4005 (1970).
- [16] R.M. Martin. *Phys. Rev. B*, **6**, 4546 (1972).
- [17] А.И. Губанов, С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **17**, 1463 (1975).
- [18] С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов. *ФТТ*, **37**, 2221 (1995).
- [19] *Физические величины*. Справочник, под ред. И.С. Григорьева и Е.З. Мейлихова (М., Энергоатомиздат, 1991).
- [20] F.N.H. Robinson. *Phys. Lett.*, **26A**, 435 (1968).
- [21] J. Miragliotta, W.A. Bryden, T.J. Kistenmacher, D.K. Wickenden. In: *Silicon Carbide and Related Materials. Proc. 5th Conf.*, ed by M.G. Spencer et al. [Inst. Phys. Conf. Ser., N 137 (Bristol-Philadelphia, 1993) p. 537].

Редактор Л.В. Шаронова

On the photo elasticity and quadric dielectric susceptibility of wide band gap semiconductors

S.Yu. Davydov, S.K. Tikhonov

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract On the basis of the analogy between photoelastic and elastic properties of semiconductor materials the expressions for the photoelastic module have been obtained.

The calculations are made for wide band gap semiconductors (silicon carbide and nitrides of B, Al and Ga) both for cubic and hexagonal structures. The quadric dielectric susceptibility for hexagonal structures has also been calculated.