

# Оптические свойства неупорядоченных объемных и эпитаксиальных полупроводниковых сплавов $Ga_xIn_{1-x}P$

© Я.И. Выхлюк<sup>†</sup>, В.Г. Дейбук, С.В. Золотарев

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича,  
58012 Черновцы, Украина

(Получена 16 июля 2001 г. Принята к печати 15 января 2002 г.)

Исследована электронная зонная структура объемных твердых растворов  $Ga_xIn_{1-x}P$  методом локального модельного псевдопотенциала при учете несогласованности постоянных решетки. Возникающая вследствие этого локальная деформация решетки учтена при расчетах эффективных масс и деформационных потенциалов. Наличие внутренних локальных деформаций и антиструктурных дефектов в сплавах  $Ga_xIn_{1-x}P$  позволяет объяснить их основные оптические характеристики. В сравнении с объемными образцами в псевдоморфных тонких пленках концентрационные зависимости спектральных пиков  $E_1$ ,  $E_1 + \Delta_1$  являются более чувствительными к деформациям со стороны подложки, чем край фундаментального поглощения  $E_0$ .

## 1. Введение

В последнее время сплавы  $Ga_xIn_{1-x}P$  вызывают повышенный интерес в связи с их использованием в приборах. Изучение деформационной зависимости оптических свойств как объемных, так и эпитаксиальных образцов важно для более полного их применения. В частности, уникальные гетероструктурные свойства сделали системы на основе  $Ga_xIn_{1-x}P$  привлекательными для создания электронных и оптических приборов, таких как биполярные и полевые транзисторы на гетеропереходах, солнечные элементы, светоизлучающие диоды, а также полупроводниковые инжекционные лазеры видимого диапазона [1,2].

Базисные характеристики и физические параметры  $Ga_xIn_{1-x}P$ , однако, еще не достаточно изучены, что вызвано трудностями в получении высококачественных кристаллов, поскольку несогласованность постоянных решеток GaP (5.424 Å) и InP (5.869 Å) составляет 7.6% и является наибольшей среди соединений  $A^{III}B^V$ .

Тройные полупроводниковые сплавы на основе соединений  $A^{III}B^V$  со структурой цинковой обманки обычно кристаллизуются как неупорядоченные сплавы, в которых одна из двух гранецентрированных кубических подрешеток (анионная или катионная) является химически неупорядоченной. Экспериментальные исследования кристаллической структуры тройных твердых растворов на основе  $A^{III}B^V$  методом растянутой тонкой структуры рентгеновского поглощения (EXAFS) позволили определить характерные особенности этих материалов [3]. Во-первых, подрешетка, содержащая атомы двух типов, структурно близка к виртуальному кристаллу и удовлетворяет закону Вегарда. Во-вторых, другая подрешетка сильно искажена, так что расстояния до ближайших соседних атомов лишь слабо зависят от состава раствора. Возникающие при этом локальные внутренние напряжения могут стать причиной фазовых преобразований: с одной стороны — распада, с другой стороны — формирования суперструктур [4]. Кроме этого,

хорошо известно, что деформации часто приводят к оптической активности в полупроводниках [5]. Известно, что наличие биаксиальной деформации в эпитаксиальных пленках со стороны подложки также влияет на оптические характеристики сплава. Изотропная деформация приводит к сдвигу энергий валентных зон и зон проводимости, анизотропная деформация понижает кристаллическую симметрию и, как следствие, расщепляет вырожденные зоны тяжелых и легких дырок в точке Г. В то время как деформационная зависимость запрещенной зоны  $E_0$  довольно детально изучена [6], экспериментальные данные деформационной зависимости спектральных пиков  $E_1$  и  $E_2$  [7] не получили пока удовлетворительного теоретического объяснения. Поэтому в данной работе исследуется влияние внутренних локальных и биаксиальных деформаций на поведение  $E_1$  и  $E_2$  в объемных и эпитаксиальных образцах  $Ga_xIn_{1-x}P$ . Для расчета электронной зонной структуры был использован метод локального модельного псевдопотенциала, включающий деформационно-зависимую поправку [8]. Это позволило рассчитать действительную и мнимую части диэлектрической функции, а также исследовать зависимость положения основных максимумов мнимой части диэлектрической функции от состава раствора как для объемного образца, так и для тонких псевдоморфных пленок на подложках GaP и GaAs.

## 2. Электронная зонная структура

Традиционные эмпирические псевдопотенциалы  $v(q)$ , заданные лишь для дискретных значений волнового вектора, не в состоянии корректно отобразить экспериментально измеренные эффективные массы, деформационные потенциалы и другие электронные характеристики разнообразных полупроводниковых структур. Поэтому в данной работе мы воспользовались методом локального модельного псевдопотенциала, который в

<sup>†</sup> E-mail: vyklyuk@mail.ru

**Таблица 1.** Псевдопотенциальные параметры, используемые в расчетах GaP и InP

Параметр	GaP		InP	
	Ga	P	In	P
$a_0, \text{эВ}$	1.485	0.0587	0.692	0.0406
$a_1, 4\pi^2/a^2$	6.268	7.644	5.820	9.010
$a_2$	62.023	1.217	14.049	1.204
$a_3, a^2/4\pi^2$	0.0406	0.126	0.0798	0.114
$a_4$	7.9	0	3.32	0
$\lambda^S, \text{эВ}$	0.0001		0.00203	
$\lambda^A, \text{эВ}$	0.00034		0.0005	

Примечание.  $a$  — постоянная решетки.

базисе плоских волн приводит к секулярной задаче [9]:

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

где  $\mathbf{G}, \mathbf{G}'$  — векторы обратной решетки. Первый член соответствует кинетической энергии, второй — локальному модельному псевдопотенциалу  $V_{ps}(|\mathbf{G} - \mathbf{G}'|)$ , третий — спин-орбитальному взаимодействию,

$$V_{SO}^{ss'}(\mathbf{G}, \mathbf{G}') = (\mathbf{G} \times \mathbf{G}') \sigma_{s,s'} \times \{ -i\lambda^S \cos(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \boldsymbol{\tau} + \lambda^A \sin(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \boldsymbol{\tau} \}, \quad (2)$$

где  $s$  и  $s'$  — спиновые состояния,  $\boldsymbol{\tau} = (a/8)[1, 1, 1]$ ,  $a$  — постоянная решетки,  $\sigma$  — матрицы Паули,  $\lambda^S, \lambda^A$  — подгруппочные параметры спин-орбитального взаимодействия.

Учтем локальные деформации, возникающие в сплавах, дополнив атомный псевдопотенциал  $v_\alpha(G)$  множи-

телем  $[1 + \delta v_\alpha(\epsilon)]$  [8], тогда

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

где  $\epsilon$  — относительная локальная деформация,  $\Omega$  — объем элементарной ячейки,  $\mathbf{R}_{\alpha,n}$  — положение  $n$ -го атома сорта  $\alpha$ .

В линейном по деформации приближении

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

Для структуры цинковой обманки выполняются условия

$$a_{xx} = a_{yy} = a_{zz},$$

$$a_{ij} = 0 \quad \text{при} \quad i \neq j. \quad (5)$$

Тогда (4) примет вид

$$\delta v_\alpha(\epsilon) \propto \text{Sp}(\epsilon). \quad (6)$$

Выбор функциональной формы экранированного псевдопотенциала диктуется условием достаточной его гибкости при описании возможно большего количества физических характеристик. При этом количество параметров псевдопотенциала должно находиться в разумных пределах, а сами параметры не должны значительно изменяться при оптимизации электронной структуры. Выберем псевдопотенциал в форме [10]

$$v_\alpha(\mathbf{G}) = a_{0\alpha} \frac{(\mathbf{G}^2 - a_{1\alpha})}{a_{2\alpha} \exp(a_{3\alpha} \mathbf{G}^2) - 1}, \quad (7)$$

причем

$$\delta v_\alpha(\epsilon) = a_{4\alpha} \text{Sp}(\epsilon). \quad (8)$$

В табл. 1 приведены значения псевдопотенциальных параметров  $a_0, a_1, a_2, a_3, a_4$ , а также  $\lambda^S, \lambda^A$ . Процедура

**Таблица 2.** Энергии межзонных расстояний в некоторых симметричных точках зоны Бриллюэна, эффективные массы электронов  $m_e$  и тяжелых дырок  $m_{hh}$  и деформационные потенциалы при 0 К для GaP и InP

Параметр	GaP			InP		
	Теоретические расчеты		Экспериментальные данные	Теоретические расчеты		Экспериментальные данные
	наши данные	[9]		наши данные	[9]	
$\Gamma_{6c} - \Gamma_{8v}$	3.06	2.88	2.86 [12]	1.51	1.50	1.46 [16]
$X_{6c} - X_{7v}$	4.50	4.89	5.05 [13,14]	4.42	4.50	4.62 [16]
$L_{6c} - L_{4,5v}$	3.53	3.85	3.91 [13,15]	3.06	3.13	3.22 [17]
$X_{6c} - \Gamma_{8v}$	2.52	2.16	2.35 [14]	2.84	2.44	2.38 [16]
$\Delta_0$	0.211	—	—	0.377	—	—
$m_e$	0.17	—	0.127 [18]	0.068	—	0.077 [19]
$m_{hh}$ [100]	0.42	—	0.45 [18]	0.45	—	0.56 [19]
$a_g$	-9.3	—	-9.3 [11]	-6.4	—	-6.4 [11]
$a_v$	-10.4	—	-10.6 [11]	-11.6	—	-11.6 [11]
$a_c$	-19.7	—	-19.9 [11]	-18.0	—	-18.0 [11]

Примечание. Энергии приведены в эВ, эффективные массы — в единицах массы свободного электрона  $m_0$ , деформационные потенциалы — в эВ.

нахождения псевдопотенциалов сводилась к подгонке равновесной зонной структуры для бинарных полупроводников InP и GaP. После этого коэффициенты  $a_4$  для катионов выбирались так, чтобы согласовать рассчитанные значения гидростатических деформационных потенциалов с экспериментальными. В табл. 2 приведены рассчитанные нами энергетические межзонные расстояния InP и GaP в некоторых высокосимметричных точках зоны Бриллюэна в сравнении с полученными методом нелокального псевдопотенциала [9] и экспериментальными значениями. Рассчитанные значения эффективных масс электронов дна зоны проводимости ( $m_e$ ) и тяжелых дырок ( $m_{hh}$ ) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Гидростатический деформационный потенциал запрещенной зоны ( $E_g$ ) в точке  $\Gamma$  определяется как

$$a_g = \Omega \frac{\partial E_g}{\partial \Omega}. \quad (9)$$

Деформационный потенциал максимума валентной зоны  $a_v$  определяется аналогично, тогда деформационный потенциал минимума зоны проводимости  $a_c = a_g + a_v$ . Наши расчеты дают довольно хорошее согласие деформационных потенциалов с экспериментальными [11] как по величине, так и по знаку.

Влияние температуры на зонную структуру твердых растворов  $Ga_xIn_{1-x}P$  учитывалось при помощи теории Брукса-Ю [9] и детально описано в нашей предыдущей работе [20].

Согласно правилу Вегарда и приближению виртуального кристалла (VCA) в твердом растворе  $Ga_xIn_{1-x}P$  постоянная решетки и псевдопотенциалы определяются как линейные комбинации соответствующих величин для InP ( $a_{InP}$ ,  $V_{InP}$ ) и GaP ( $a_{GaP}$ ,  $V_{GaP}$ ):

$$\begin{aligned} a_{ss} &= a_{GaP}x + a_{InP}(1-x), \\ V_{ss} &= V_{GaP}x + V_{InP}(1-x), \end{aligned} \quad (10)$$

где  $a_{ss}$  и  $V_{ss}$  — постоянная решетки и псевдопотенциальный форм-фактор твердого раствора замещения.

Слабое отличие псевдопотенциала аниона (P) в соединениях InP и GaP подтверждает экспериментальный факт слабой зависимости параметра анионной подрешетки от состава тройного твердого раствора [3].

Все сказанное позволяет нам перейти к нахождению диэлектрической функции и оптических характеристик, используя рассчитанную зонную структуру  $Ga_xIn_{1-x}P$  с учетом внутренних локальных деформаций.

### 3. Оптические характеристики

Рассчитанная электронная зонная структура непосредственно связана с комплексной диэлектрической функцией полупроводника  $\epsilon(E) = \epsilon_1(E) + i\epsilon_2(E)$ , которая описывает оптический отклик среды для произвольной энергии фотона  $E = \hbar\omega$ . Значение комплексной диэлектрической функции позволяет отыскать другие оптические

характеристики, в частности показатель преломления среды ( $n$ ), коэффициент поглощения ( $\alpha$ ), коэффициент отражения ( $R$ ) и другие связанные с ними величины. Мнимая часть диэлектрической функции [9]

$$\begin{aligned} \epsilon_2(E) &= \frac{4\pi^2\hbar^2e^2}{m^2E^2} \\ &\times \sum_{vc} \int_{ZB} \frac{2d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{vc}(\mathbf{k})|^2 \delta[E_c(\mathbf{k}) - E_v(\mathbf{k}) - E], \end{aligned} \quad (11)$$

где

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

$\mathbf{e}$  — вектор поляризации,  $\mathbf{p}$  — оператор импульса. Суммирование ведется по начальным индексам валентных зон ( $v$ ) и конечным состояниям зон проводимости ( $c$ ). При суммировании были учтены восемь верхних валентных зон и четыре нижние зоны проводимости. Интегрирование проводилось по первой зоне Бриллюэна (ZB) методом тетраэдров [21], причем зона Бриллюэна была разделена на 3000 равновеликих тетраэдров. Матричные элементы (12) рассчитывались на полученных псевдоволновых функциях и контролировались при помощи правил отбора [22]. При расчетах  $\epsilon_2(E)$  экситонные эффекты не учитывались. Поскольку GaP является непрямозонным полупроводниковым соединением, то при расчете  $\epsilon_2(E)$  были учтены не прямые межзонные

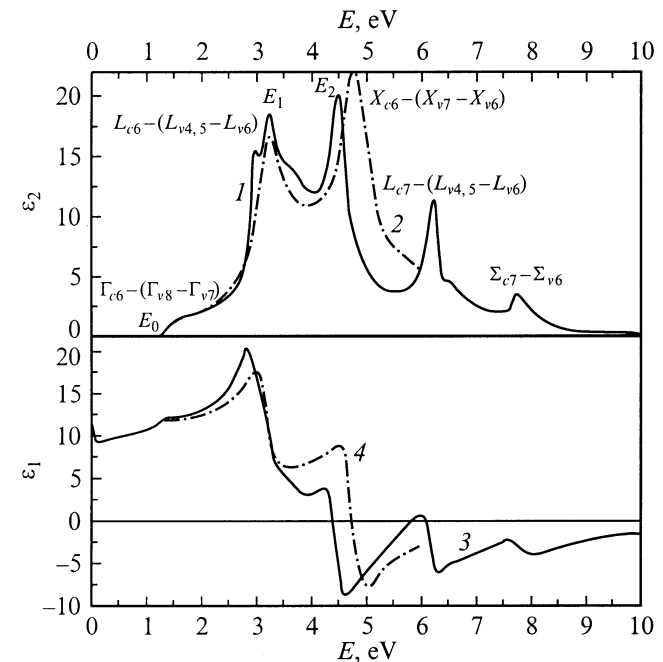
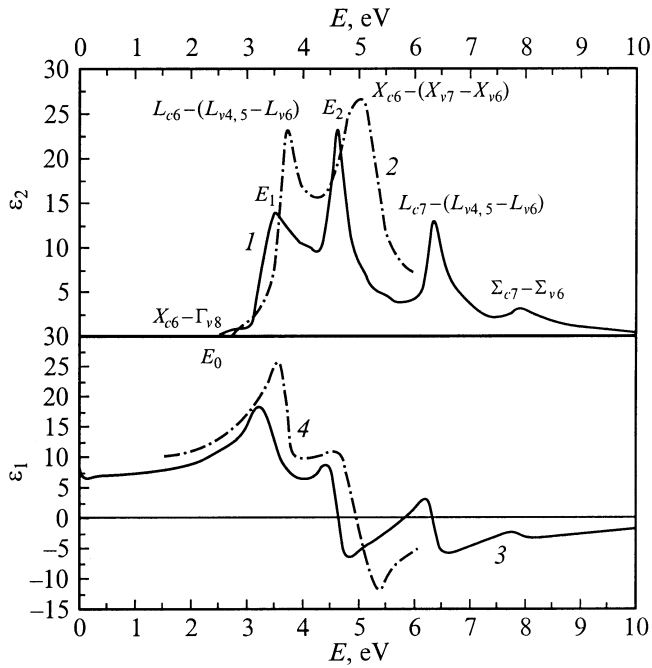


Рис. 1. Действительная ( $\epsilon_1$ ) и мнимая ( $\epsilon_2$ ) части диэлектрической функции InP при 300 K. 1, 3 — наши расчеты; 2, 4 — экспериментальные данные [23].



**Рис. 2.** Действительная ( $\varepsilon_1$ ) и мнимая ( $\varepsilon_2$ ) части диэлектрической функции GaP при 300 K. 1, 3 — наши расчеты; 2, 4 — экспериментальные данные [23].

переходы, тогда в случае поглощения фононов  $\hbar\omega_q$  [22]

$$\varepsilon_2(E) = \frac{4\pi^2 h^2 e^2}{m^2 E^2} \int_{\text{ZB}} \int_{\text{ZB}} \frac{2d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3 (2\pi)^3} \times \left| \frac{\langle \psi_{c\mathbf{k}_2} | V_p(\mathbf{q}, \mathbf{r}) | \psi_{\beta\mathbf{k}_1} \rangle n_q^{1/2} \langle \psi_{\beta\mathbf{k}_1} | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | \psi_{v\mathbf{k}_1} \rangle}{E_{\beta}(\mathbf{k}_1) - E_v(\mathbf{k}_1) - E} \right|^2 \times \delta[E_c(\mathbf{k}_2) - E_v(\mathbf{k}_1) - E - \hbar\omega_q], \quad (13)$$

где  $n_q$  — числа заполнения фононных состояний, участвующих в переходах.

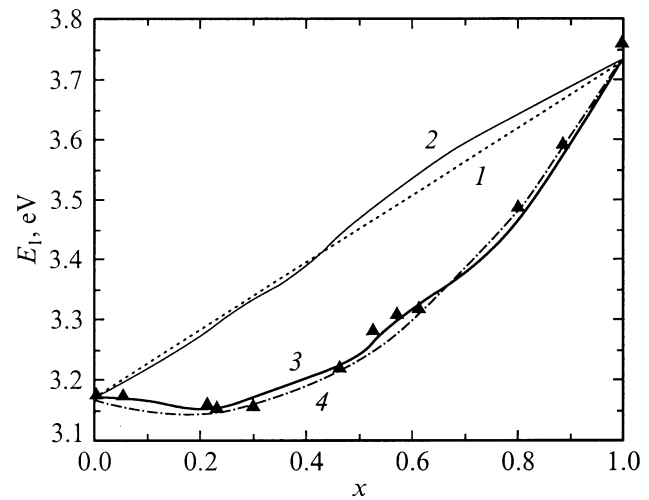
Действительная часть диэлектрической функции  $\varepsilon_1(E)$  рассчитывалась с использованием соотношения Крамерса–Кронига. На рис. 1, 2 результаты наших расчетов  $\varepsilon_1(E)$  и  $\varepsilon_2(E)$  для InP и GaP соответственно сопоставляются с экспериментальными зависимостями [23]. Детальный анализ межзонных переходов и идентификация основных пиков рассмотрены в нашей предыдущей работе [24].

Из общей теории оптических межзонных переходов известно, что спектр  $\varepsilon_2(E)$  количественно определяется корректностью расчетов дисперсии зон, вероятностью электронных переходов и учетом всех точек зоны Бриллюэна.

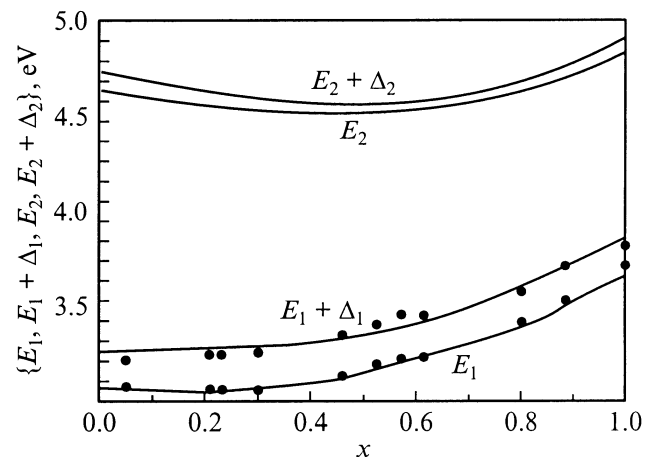
#### 4. Объемный кристалл

Получив хорошее согласие действительной и мнимой частей диэлектрической функции GaP и InP с экспериментом, перейдем к рассмотрению поведения мнимой

части  $\varepsilon_2$  для сплава. Исследуем сначала, как изменяется положение пика  $E_1$ , точное положение которого мы определяли из анализа второй производной  $d^2(\varepsilon_2)/d\omega^2$ . (Поведение  $E_0$  мы исследовали в работе [20]). С использованием закона Вегарда получена линейная зависимость  $E_1(x)$  (рис. 3), которая значительно отличается от экспериментальной. Последнюю можно аппроксимировать как  $E_1(x) = 3.18 + 0.58x + 0.86x(x-1)$  [25]. Для объяснения прогиба мы вначале учли тот факт, что постоянная решетки сплава изменяется по нелинейному закону [26], что обуславливается наличием локальных деформаций [8]. Последние в свою очередь можно учесть при помощи модифицированного псевдопотенциала (3),



**Рис. 3.** Концентрационная зависимость пика  $E_1$  для объемного сплава: 1 — учет только закона Вегарда; 2 — учет нелинейности постоянной решетки; 3 — учет нелинейности постоянной решетки и антиструктурных дефектов; 4 — аппроксимация экспериментальных данных [25]; точки — экспериментальные данные [25].



**Рис. 4.** Концентрационные зависимости пиков  $E_1(x)$ ,  $E_1(x) + \Delta_1(x)$ ,  $E_2(x)$ ,  $E_2(x) + \Delta_2(x)$  для объемных образцов  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ . Точки — экспериментальные данные [25].

причем относительное изменение объема элементарной ячейки есть

$$\text{Sp}(\epsilon) = \frac{\Delta\Omega}{\Omega}. \quad (14)$$

Как видно из рис. 3, этот вклад в отклонение зависимости  $E_1(x)$  от линейной незначителен. Большое различие между постоянными решеток InP и GaP обуславливает также образование антиструктурных дефектов [27], влияние которых на зонную структуру сплава было учтено нами в предыдущей работе [20]. Присутствие антиструктурных дефектов приводит к прогибу зависимостей  $E_1(x)$  и  $E_1(x) + \Delta_1$ , что довольно хорошо согласуется с экспериментальными данными [24] (рис. 3, 4). Расчеты  $E_2(x)$  и  $E_2(x) + \Delta_2(x)$  представлены на рис. 4. Прогиб  $E_2(x)$  и  $E_2(x) + \Delta_2(x)$  меньше, чем прогиб  $E_1(x)$  и  $E_1(x) + \Delta_1(x)$ , и минимум его расположен в  $x = 0.5$ . Кроме того,  $\Delta_2 < \Delta_1$ . Это связано с тем, что расщепление верхней валентной зоны в точке X меньше, чем в точке L [20]. Детальный анализ межзонных переходов показал, что основной вклад в пики  $E_1$  и  $E_1 + \Delta_1$  дают переходы в направлении  $\Lambda$  зоны Бриллюэна, где валентная зона и зона проводимости почти ковалентны. Вклад в  $E_2$  вносят переходы в точке X и в  $\Sigma$ -направлении.

### 5. Влияние биаксиальной деформации в пленках

Эпитаксиальное выращивание полупроводниковых сплавов с параметрами решетки, отличающимися от параметра решетки подложки, ведет к деформации рассогласования в эпитаксиальном слое. Такая деформация может упруго релаксировать при помощи тетрагональной дисторсии при условии, что толщина эпитаксиального слоя не слишком велика (псевдоморфная пленка). С увеличением рассогласования постоянных решетки слоя и подложки или толщины слоя последний будет релаксировать в направлении его объемной структуры с образованием дислокаций несоответствия.

Для тонких псевдоморфных пленок InGaP оптические характеристики исследовались экспериментально в ряде работ [7, 28, 29]. Было установлено, что оптические характеристики пленок отличаются от объемных образцов, зависят от материала подложки и имеют особенности концентрационной зависимости  $E_1(x)$ . Для их объяснения кроме вышеуказанных факторов, которые имеют место в объемных образцах, мы учли наличие биаксиальной деформации, появляющейся в эпитаксиальной пленке под влиянием подложки. Форма выбранного нами псевдопотенциала позволяет учесть также и биаксиальную деформацию в пленке. Компоненты тензора деформации

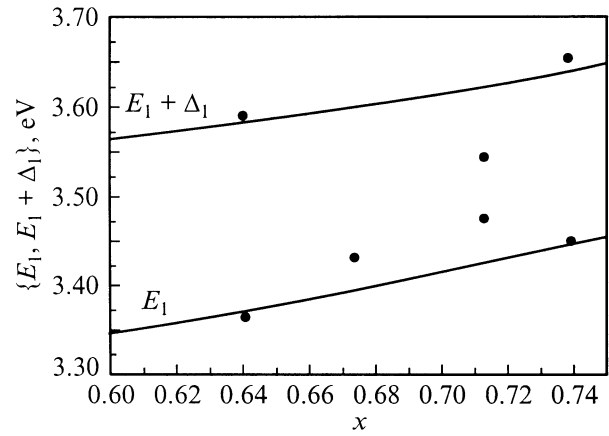


Рис. 5. Концентрационные зависимости пиков  $E_1(x)$ ,  $E_1(x) + \Delta_1(x)$  для  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}/\text{GaP}$ . Точки — экспериментальные данные [7].

в этом случае можно записать как [1]

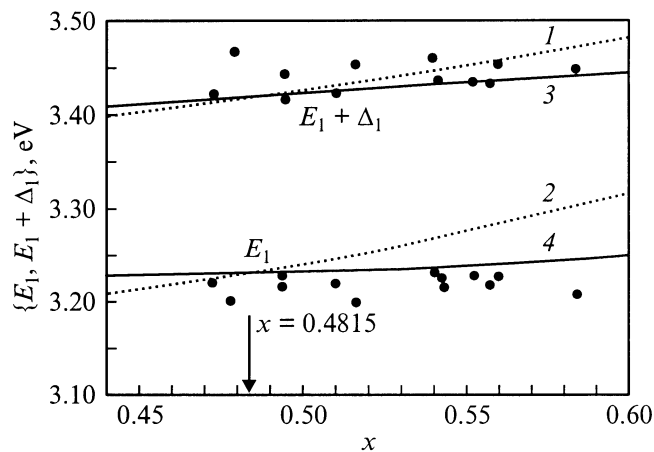
$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} &= \epsilon_{yy} = -\delta, \\ \epsilon_{zz} &= \frac{2C_{12}}{C_{11}} \delta, \end{aligned} \quad (15)$$

где  $\delta = (a_{\text{InGaP}} - a_{\text{sub}})/a_{\text{sub}}$ ,  $a_{\text{InGaP}}$  и  $a_{\text{sub}}$  — постоянные решетки объемного сплава и подложки соответственно.

Как показали наши расчеты и теоретические исследования [1], наличие биаксиальной деформации изменяет зонную структуру следующим образом: при деформации сжатия (постоянная решетки подложки меньше постоянной решетки пленки) ширина запрещенной зоны увеличивается за счет поднятия зоны проводимости, в то время как положение верхней валентной зоны практически не изменяется; в случае деформации растяжения все происходит наоборот — нижняя зона проводимости опускается, а положение верхней валентной зоны также практически не изменяется, и ширина запрещенной зоны уменьшается.

Мы исследовали две подложки: GaAs и GaP. При наличии подложки GaP в сплаве InGaP возникают деформации сжатия за счет того, что постоянная решетки пленки больше постоянной решетки подложки. Как было сказано выше, деформации сжатия приводят к расширению запрещенной зоны, что в свою очередь смещает пики  $E_1$  и  $E_2$  в сторону больших энергий. Следовательно, прогиб зависимостей  $E_1(x)$  и  $E_2(x)$  при наличии подложки GaP будет меньшим, чем в объемных образцах. На рис. 5 приведены результаты наших расчетов в сравнении с экспериментальными данными для  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}/\text{GaP}$  [7].

С подложкой GaAs ситуация несколько иная. Постоянная решетки сплава совпадает с постоянной решетки подложки при  $x = 0.4815$ . Следовательно, при  $x < 0.4815$  в подложке возникают деформации сжатия, которые смещают пики  $E_1$  и  $E_2$  в сторону больших



**Рис. 6.** Концентрационные зависимости пиков  $E_1(x)$ ,  $E_1(x) + \Delta_1(x)$  для  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}/\text{GaAs}$ : 1, 2 — объемный образец  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ ; 3, 4 —  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}/\text{GaAs}$ . Точки — экспериментальные данные [7].

энергий, а при  $x > 0.4815$  — деформации растяжения, которые смещают эти пики в сторону меньших энергий. Это приводит к тому, что прогиб концентрационной зависимости пиков  $E_1(x)$  и  $E_2(x)$  пленки значительно уменьшается относительно прогиба объемного образца, а для  $x = 0.45-0.7$  положения пиков  $E_2$  и  $E_2 + \Delta_2$  практически не изменяются. Для  $E_1$  и  $E_1 + \Delta_1$  этот промежуток намного шире,  $x = 0.2-0.9$ , что также подтверждается экспериментально [7] (рис. 6). Из сказанного следует, что оптические характеристики, а также зонная структура тонких пленок существенно отличаются от характерных для объемных образцов. Учет биаксиальной деформации позволяет корректно объяснить основные особенности оптических характеристик тонких пленок.

## 6. Заключение

Исследована электронная зонная структура объемных твердых растворов  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$  методом локального модельного псевдопотенциала при учете несогласованности постоянных решетки. Возникающая вследствие этого локальная деформация решетки была учтена при расчетах эффективных масс и деформационных потенциалов. Наличие внутренних локальных деформаций и антиструктурных дефектов в сплавах  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$  позволяет объяснить их основные оптические характеристики.

В сравнении с объемными образцами в псевдоморфных тонких пленках концентрационные зависимости пиков  $E_1$ ,  $E_1 + \Delta_1$  являются более чувствительными к деформациям со стороны подложки, чем край фундаментального поглощения  $E_0$ .

## Список литературы

- [1] S.C. Jain, M. Willander, H. Maes. *Semicond. Sci. Technol.*, **11**, 641 (1996).
- [2] G.M. Cohen, P. Zisman, G. Bahir, D. Ritter. *J. Vac. Sci. Technol. B*, **16**, 2639 (1998).
- [3] J.C.Jr. Mikkelsen, J.B. Boys. *Phys. Rev. B*, **28**, 7130 (1983).
- [4] R. Asomoza, V.A. Elyukhin, S.G. Konnikov. *Semicond. Sci. Technol.*, **10**, 1122 (1995).
- [5] B. Koopmans, P.V. Santos, M. Cardona. *Phys. St. Sol. (b)*, **205**, 419 (1998).
- [6] K. Ozasa, M. Yuri, S. Tanaka, H. Matsunami. *J. Appl. Phys.*, **68**, 107 (1990).
- [7] H. Lee, D. Biswas, M.V. Klein, H. Markoc, D.E. Aspnes, B.D. Choe, J. Kim, C.O. Griffiths. *J. Appl. Phys.*, **75**, 5040 (1994).
- [8] T. Matilla, L.-W. Wang, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **59**, 15 270 (1999).
- [9] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky. *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors* (Berlin, Springer Verlag, 1988).
- [10] M. Schluter, J.R. Chelikowsky, S.G. Louis, M.L. Cohen. *Phys. Rev. B*, **12**, 4200 (1975).
- [11] A. Blacha, H. Presting, M. Cardona. *Phys. St. Sol. (b)*, **126**, 11 (1984).
- [12] D. Nelson, L. Johnson, M. Gershenson. *Phys. Rev.*, **135**, A1399 (1964).
- [13] L. Ley, R. Pollak, R. McFeely, S. Kowalczyk, D.A. Sherlet. *Phys. Rev. B*, **9**, 600 (1974).
- [14] D. Kyser, V. Rehn. *Phys. Rev. Lett.*, **40**, 1038 (1978).
- [15] D. Aspnes, C. Olson, D. Lynch. *Phys. Rev. B*, **12**, 1371 (1975).
- [16] J. Camassel, P. Merle, L. Bayo, H. Mathieu. *Phys. Rev. B*, **22**, 2020 (1980).
- [17] E. Matatagui, A. Thompson, M. Cardona. *Phys. Rev.*, **176**, 950 (1968).
- [18] S.-G. Shen, X.-Q. Fan. *J. Phys.: Condens. Matter*, **8**, 4369 (1996).
- [19] M. Helm, W. Кнар, W. Seidenbusch, R. Lassig, E. Gornik. *Sol. St. Commun.*, **53**, 547 (1985).
- [20] С.В. Королук, Я.И. Виллюк, В.Г. Дейбук. *УФЖ*, **45**, 318 (2000).
- [21] G. Lehmann, M. Taut. *Phys. St. Sol. (b)*, **54**, 469 (1972).
- [22] Ф. Бассани, Дж.П. Парравичини. *Электронные состояния и оптические переходы в твердом теле* (М., Наука, 1982).
- [23] D.E. Aspnes, A.A. Studna. *Phys. Rev. B*, **27**, 985 (1983).
- [24] Я.И. Виллюк, В.Г. Дейбук. *УФЖ*, **46**, 1185 (2001).
- [25] C. Alibert, G. Bordure, A. Laugier, J. Chevallier. *Phys. Rev. B*, **6**, 1301 (1972).
- [26] J.L. Martins, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **30**, 6217 (1984).
- [27] А.Н. Георгобиани, И.М. Тигиняну. *ФТП*, **22**, 3 (1988).
- [28] A. Bensaada, A. Chennouf, R.W. Cochrane, J.T. Graham, R. Leonelli, R.A. Masut. *J. Appl. Phys.*, **75**, 3024 (1994).
- [29] F.H. Pollak, M. Cardona. *Phys. Rev.*, **172**, 816 (1968).

Редактор Л.В. Шаронова

## Optical properties of bulk and epitaxial disorder $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ semiconductor alloys

*Y.I. Vyklyuk, V.G. Deibuk, S.V. Zolotariov*

Chernovtsy National University,  
58012 Chernovtsy, Ukraine

**Abstract** The electron band structure of  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$  solid solutions is calculated by the local model pseudopotential method accounting for the lattice constant mismatch. Resulting local strain of the lattice was taken into account in calculations of effective masses and deformation potentials. The main optical characteristics of  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$  alloys could be explained considering existence of the internal local deformations and antisite defects. The concentration dependencies of peaks  $E_1$ ,  $E_1 + \Delta_1$  in pseudomorphic thin films is more sensitive than the band gap  $E_0$  to the deformations made by the substrate in comparison with bulk samples.