

РАСЧЕТ СПЕКТРА ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ СОЕДИНЕНИЙ A_3B_5

Сологуб О. Ю.

Харьковский национальный университет радиоэлектроники
пр. Ленина, 14, Харьков, 61009, Украина
тел.: +38 (057) 7021362, e-mail: teru@kture.kharkov.ua

Аннотация — В работе приведена модель для расчета спектральной зависимости края собственного поглощения полупроводниковых твердых растворов с прямой структурой энергетических зон на примере GaAs. Данная модель хорошо согласуется с экспериментальными данными для p-GaAs и требует уточнения для n-GaAs. Несмотря на это, может быть использована в математических моделях, описывающих работу фотоэлектрических преобразователей.

I. Введение

Твердые растворы полупроводниковых соединений A_3B_5 являются основными для изготовления инжекционных лазеров, светодиодов, оптических модуляторов и других компонентов микро- и нанозлектронных устройств. Современные тенденции в мировой энергетике стимулируют существенный рост к альтернативным источникам энергии, таким как солнечные элементы. Полупроводниковые гетероструктуры на основе соединений A_3B_5 предложенные Ж. И. Алферовым в 1966 году [1], являются более перспективными для создания фотоэлектрических преобразователей (ФЭП). Одними из основных преимуществ ФЭП на основе данных соединений, по сравнению с кремниевыми, являются более высокая эффективность преобразования концентрированного солнечного излучения, повышенная температурная и радиационная стойкость. Свойства и характеристики бинарных соединений A_3B_5 , в том числе их спектры фундаментального оптического поглощения, представлены в многочисленных справочниках и обзорах [2, 3].

Целью работы является численное исследование зависимости края собственного поглощения полупроводниковых материалов A_3B_5 (например, GaAs), от концентрации примесей, а также сравнение полученных данных с экспериментальными.

II. Основные физические положения

В силу адиабатического приближения процессы, приводящие к оптическому поглощению можно разбить на две группы:

- процессы, в результате которых энергия электромагнитного поля передается электронной подсистеме;

- поглощение фотона сопровождается возбуждением одного или нескольких фононов.

Данным случаям в идеальном кристалле соответствует собственное фундаментальное межзонное поглощение и собственное решеточное поглощение. Наличие примесей и свободных носителей заряда в реальных кристаллах приводит к появлению дополнительного примесного поглощения и поглощения свободными носителями заряда. Форма края собственного поглощения определяется, прежде всего, особенностями структуры энергетических зон материала. В кристаллах с прямой структурой энергетических зон, к которым относится GaAs, определяется прямыми оптическими переходами. Зонная диаграмма GaAs представлена на рис. 1.

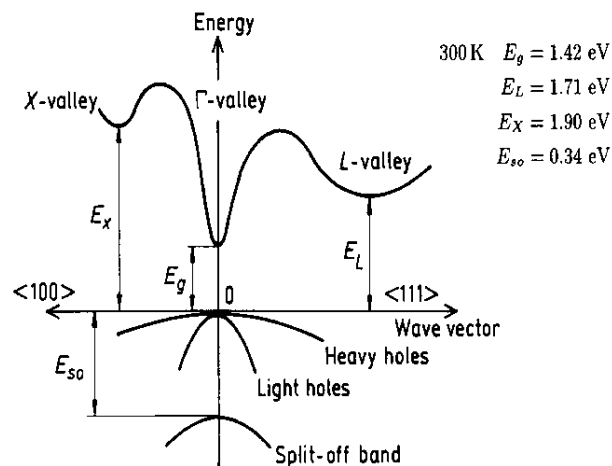


Рис. 1. Зонная диаграмма GaAs при $T=300$ K.

Fig. 1. GaAs band structure at $T=300$ K

В сильнолегированных полупроводниках наблюдается уменьшение ширины запрещенной зоны от концентрации примеси (таблица 1) [4].

Таблица 1. Параметры энергетических зон GaAs p-типа при $T=297$ K

Table 1. Parameters of the energy bands of GaAs p-type at $T = 297$ K

$p_{0,3}$ см ⁻³	Примесь	N_a , см ⁻³	N_{A_3} см ⁻³	E_g , эВ	μ , см ² /(В·с)
$1,2 \cdot 10^{18}$	Zn	$1,5 \cdot 10^{18}$	$3 \cdot 10^{17}$	1,408	162
$2,4 \cdot 10^{18}$	Zn	$3 \cdot 10^{18}$	$6 \cdot 10^{17}$	1,403	102
$1,6 \cdot 10^{19}$	Zn	$2 \cdot 10^{19}$	$4 \cdot 10^{18}$	1,381	67

В высокочистом GaAs ширина запрещенной зоны при температур 297 K составляет 1,424 эВ. Сужение запрещенной зоны определяется как разность между 1,424 эВ и E_g из таблицы 1. Полученные данные проявляют зависимость вида $p_0^{1/3}$ и могут быть описаны формулой [4].

$$E_g = 1,424 - 1,6 \cdot 10^{-8} \cdot p_0^{1/3}$$

Для прямых разрешенных оптических переходов между валентной зоной и зоной проводимости при условии их параболичности (без учета конечности времени жизни, взаимодействия с фононами, примесями и т.п., приводящие к уширению спектров) спектр коэффициента поглощения описывается классической формулой [5].

$$\alpha(h\nu) = \frac{e^2 \cdot h}{4 \cdot n_r \cdot c \cdot \epsilon_0 \cdot m_0} \cdot \left(\frac{2 \cdot p_{cv}}{m_0} \right) \cdot \frac{N_{cv}(h\nu)}{h\nu} \cdot \frac{2}{3}$$

где n_r - коэффициент преломления, для GaAs равен 3,4;

$$2 \cdot p_{cv}^2 / m_0 \approx 23 \text{ эВ};$$

$$N_{cv}(h\nu) = \frac{\sqrt{2} \cdot (0,065 \cdot m_0)^{3/2} \cdot (E - E_g)^{1/2}}{\pi^2 \cdot \hbar^3}$$

плотность состояний.

На рис. 2 приведены теоретические кривые, аппроксимирующие край фундаментального поглощения GaAs при T=300 К, для различных значений концентрации примесей р-типа.

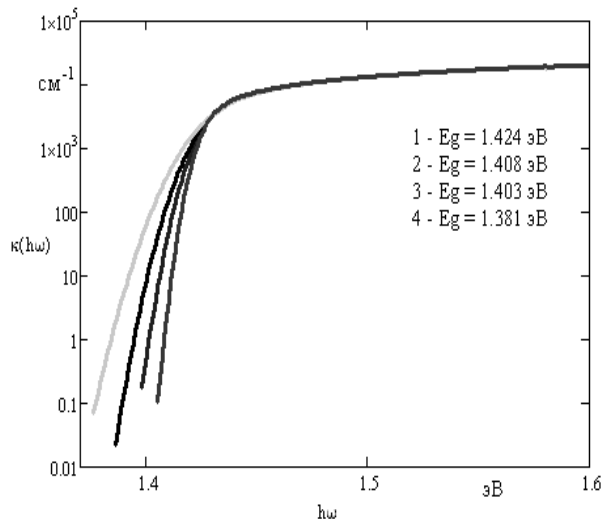


Рис. 2. Теоретическая аппроксимация края фундаментального поглощения GaAs при T=300 К.

Fig. 2. Theoretical approximation of the fundamental absorption edge of GaAs at T = 300 K

III. Заключение

Из проведенного сравнения экспериментальных и вычисленных значений коэффициента поглощения следует, что в модели для расчета оптических спектров необходимо использовать как плотность состояний учитывающих хвосты энергетических зон, так и изменения ширины запрещенной зоны от концентрации примесей. Для p-GaAs модель дает правильную форму коэффициента поглощения и показывает ее изменение с увеличением концентрации дырок, согласующиеся с экспериментальными данными, однако при низких энергиях спад рассчитанной кривой происходит значительно быстрее, чем экспериментальной, а в области высоких энергий квантов вычисленный коэффициент поглощения меньше реального. Для n-GaAs дает боль-

шое расхождение с экспериментальными данными и нуждается в доработке. Отклонения расчетного от реального коэффициента поглощения может быть обусловлено не учитываемым электронно-дырочным взаимодействием, которое приводит к изменению плотности электронных состояний и ширины запрещенной зоны. Данная модель спектральной зависимости края собственного поглощения полупроводниковых твердых растворов с прямой структурой энергетических зон в дальнейшем может быть использована в математических моделях, описывающих работу ФЭП на основе данных материалов (для оценки эффективности преобразования и коэффициента полезного действия).

IV. Список литературы

- [1] Инжекционные свойства гетеропереходов n-Al_xGa_{1-x}As - p-GaAs/ Ж. И. Алферов, В. М. Андреев, В. И. Корольков, Е. Л. Портной, Д. Н. Третьяков // ФТП. 1968. том 2, вып. 7, стр. 1016-1017.
- [2] Physical Properties of Semiconductors. URL: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM> (дата обращения: 28.04.2010).
- [3] Adachi S. Physical properties of III-V semiconductor compounds. Wiley, 1992. 329p.
- [4] Пухтин А. Н. Оптическая и квантовая электроника. М. : Высшая школа, 2001. - 573с
- [5] Mark Fox. Optical Properties Of Solids. Oxford University Press, 2001. 318p.

CALCULATION OF THE SPECTRUM OF FUNDAMENTAL OPTICAL ABSORPTION COMPOUNDS A₃B₅

Sologub O. Yu.

Kharkiv National University of Radioelectronics
14, Lenin Str., Kharkov, 61009, Ukraine
tel.: +38 (057) 7021362, e-mail: mesu@kture.kharkov.ua

Abstract — The work presents a model for the calculation of the spectral dependence of the intrinsic absorption edge of semiconductor solid solutions with a direct energy band structure at the example of GaAs. It can be used in mathematical models that describe the work of photoelectric converters.

I. Introduction

The solid solutions of A₃B₅ semiconductor compounds are key for the manufacture of injection lasers, light emitting diodes, optical modulators and other components of the micro-and nanoelectronic devices. The purpose of a numerical investigation of the dependence of the intrinsic absorption of A₃B₅ semiconductor materials (eg, GaAs), the concentration of impurities, as well as data obtained, are compared with experimental data.