

Научная статья

УДК 535:621.373.826:539

DOI 10.25205/2541-9447-2022-17-4-87-94

## Особенности определения оптических параметров ( $n$ и $\kappa$ ) полупроводниковой гетероструктуры из спектров пропускания и отражения

Александр Анатольевич Ковалёв

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН

kovalev@isp.nsc.ru

### Аннотация

Спектры показателя преломления  $n$  и коэффициента экстинкции  $\kappa$  тонкой пленки, образуемой гетероструктурой в виде сверхрешетки  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ , определяются из сравнения измеренных коэффициентов отражения и пропускания образца, выращенного на подложке GaAs, с соответствующими характеристиками, рассчитанными матричным методом. Значения  $n$  и  $\kappa$  сверхрешетки находятся из процедуры минимизации по параметрам  $n$  и  $\kappa$  целевой функции  $F(n, \kappa)$ , образованной суммой модулей разностей измеренных и рассчитанных коэффициентов отражения и пропускания.

### Ключевые слова

оптика тонких пленок, преломление, экстинкция

### Благодарности

Автор признателен сотрудникам ИФП СО РАН канд. физ.-мат. наук Б. Р. Семягину за выращивание образца полупроводниковой сверхрешетки и д-ру физ.-мат. наук Н. Н. Рубцовой за полезные обсуждения.

### Для цитирования

Ковалёв А. А. Особенности определения оптических параметров ( $n$  и  $\kappa$ ) полупроводниковой гетероструктуры из спектров пропускания и отражения // Сибирский физический журнал. 2022. Т. 17, № 4. С. 87–94. DOI 10.25205/2541-9447-2022-17-4-87-94

## Peculiarities of Determination of the Optical Parameters ( $n$ and $\kappa$ ) of a Semiconductor Heterostructure from Transmission and Reflection Spectra

Alexander A. Kovalyov

Institute of Semiconductor Physics Mechanics SB RAS

Novosibirsk, Russian Federation

kovalev@isp.nsc.ru

### Abstract

In the wavelength range  $\lambda = 900\text{--}1200$  nm, the spectral dependences of the refractive index  $n$  and extinction coefficient  $\kappa$  of a thin film, which is the heterostructure based on  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$  quantum wells, are found. The values of  $n$  and  $\kappa$  found at each point of the spectrum provide the minimum of the objective function, which is the sum of the module of the differences between the calculated reflection and transmission coefficients and the measured reflection and transmission coefficients of the sample grown on the GaAs substrate.

© Ковалёв А. А., 2022

*Keywords*

thin film optics, refraction, extinction

*For citation*

Kovalyov A. A. Peculiarities of Determination of the Optical Parameters ( $n$  and  $\kappa$ ) of a Semiconductor Heterostructure from Transmission and Reflection Spectra. *Siberian Journal of Physics*, 2022, vol. 17, no. 4, pp. 87–94. (in Russ.) DOI 10.25205/2541-9447-2022-17-4-87-94

**Введение**

При конструировании оптоэлектронных приборов различного назначения, в частности, проектировании оптических затворов, основанных на насыщении поглощения полупроводниковыми структурами, необходимо знать спектры показателя преломления  $n$  и коэффициента экстинкции  $\kappa$  всех рабочих слоёв. Используются различные методы нахождения этих спектров.

В работе [1] предложен способ нахождения толщины и коэффициента преломления тонкой ( $\sim 1$  мкм) поглощающей пленки на прозрачной подложке. Экспериментально регистрировались спектры пропускания с пиками интерференции в области длин волн 500–900 нм. Толщина пленки и значения  $n(\lambda)$  определены с точностью 1 %. Этот метод послужил основой для разработки программы [2], позволяющей находить параметры полупроводниковых и диэлектрических тонких пленок по их спектрам пропускания.

В работе [3] использована модель энергетических зон полупроводникового материала с квантовыми ямами. Для расчета спектральных зависимостей  $n$  и  $\kappa$  полупроводниковых монокристаллов  $\alpha$ -GaN и InN использованы более десяти параметров, характеризующих ширину запрещенной зоны и эффективные массы носителей заряда в валентной зоне и зоне проводимости. Для описания материала квантовых ям  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  также использовано около десяти параметров. Для нахождения оптимальных значений параметров упомянутой модели использовалась целевая функция, равная сумме по спектральным точкам нормированных разностей между рассчитанными и экспериментальными значениям  $n$  и  $\kappa$ . Сами экспериментальные значения взяты из работ [4, 5]. Окончательно получены спектры коэффициентов преломления множества квантовых ям  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  в области энергий от 1 до 9 эВ для нескольких значений концентрации индия.

В работе [6] для исследования оптических характеристик множественных квантовых ям InGaAs/GaAs использован метод спектральной эллипсометрии с переменным углом падения излучения. По измеренным эллипсометрическим параметрам определены эффективные коэффициенты преломления  $n$  и экстинкции  $\kappa$  квантовых ям в спектральной области 900–1000 нм. Результаты, найденные из измерений, сравнивались с расчетными спектрами  $n$  и  $\kappa$ . Модель включала около 20 параметров, таких как толщина квантовой ямы, эффективные массы электронов и дырок, периоды кристаллических решеток материалов ям и барьеров, компоненты тензора механических напряжений из-за несогласованности периодов кристаллических решеток ям и барьеров, разрывы в положении потолка валентной зоны и дна зоны проводимости на гетерограницах. Основной целью работы [6] было исследование изменений параметров  $n$  и  $\kappa$  в зависимости от напряженности приложенного электрического поля.

Распространенный метод определения  $n(\lambda)$  – расчет по измеренным значениям  $\kappa(\lambda)$ , основываясь на соотношениях Крамерса–Кронига, но для этого необходимо иметь результаты измерений  $\kappa(\lambda)$  в достаточно широкой спектральной области иногда с необходимостью экстраполяции [7], и это без учета, что переход от измерений  $T(\lambda)$  к  $\kappa(\lambda)$  небезошибочен из-за неучета  $n(\lambda)$ .

Предлагаемая работа определяет  $n(\lambda)$  и  $\kappa(\lambda)$  для каждой отдельной точки  $\lambda$ , независимо от других областей спектра. В общем случае для определения двух параметров необходимо сравнивать численно две рассчитанные характеристики гетероструктуры, выращенной на по-

лупроводниковой подложке, с теми же, полученными из результатов измерений. В предлагаемой работе в качестве измеренных характеристик использованы коэффициенты пропускания и отражения.

Аналогичный способ использован в [9]. Работа основана на сравнении расчетных коэффициентов отражения и пропускания с измеренными в средней ИК области для пленок диэлектриков (кварц, флюорит) на различных подложках, в том числе поглощающих. Акцент сделан на процедуре минимизации отклонений измеренных и расчетных коэффициентов отражения и пропускания

## Результаты

Для регистрации спектров пропускания и отражения использован метод однолучевого спектрометра [10], позволяющий регистрировать спектры отражения и пропускания с точностью по амплитуде сигнала на уровне  $10^{-3}$  для широкой спектральной области.

Экспериментально исследована гетероструктура, выращенная на подложке GaAs толщиной 0,4 мм. Существенно, что изучается тонкая пленка на **подложке**, которая имеет свои оптические параметры (преломление и экстинкцию). Технологически снятие пленки с подложки или перенесение на другую (диэлектрическую, более прозрачную и тонкую) довольно затруднительно, к тому же снятие, возможно успешное, существенно исказит измеряемые характеристики из-за релаксации выращенной напряженной структуры.

Структура представляет собой сверхрешетку с шестью ямами  $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$  в барьерах из GaAs. Размер ям составляет 10 периодов решетки и размер барьеров равен 7 периодам решетки. Полная толщина гетероструктуры составляет 0,054 мкм. Соответствующая оптическая толщина  $\sim 0,19$  мкм, т. е.  $\sim \lambda/4$  в рассматриваемом диапазоне длин волн. Для характеристики распространения электромагнитной волны в направлении роста структуры вводим комплексный показатель преломления  $n + ik$ . Влияние на спектры отражения дисперсии показателя преломления превосходит вклад от коэффициента экстинкции, поэтому считать, что изменение пропускания и отражения вызывается только поглощением в структуре или только изменением показателя преломления, было бы ошибочным. Измеренные спектры пропускания  $T_{\text{exp}}(\lambda)$  и отражения  $R_{\text{exp}}(\lambda)$  подложки и подложки с гетероструктурой (образца) показаны на рис. 1.

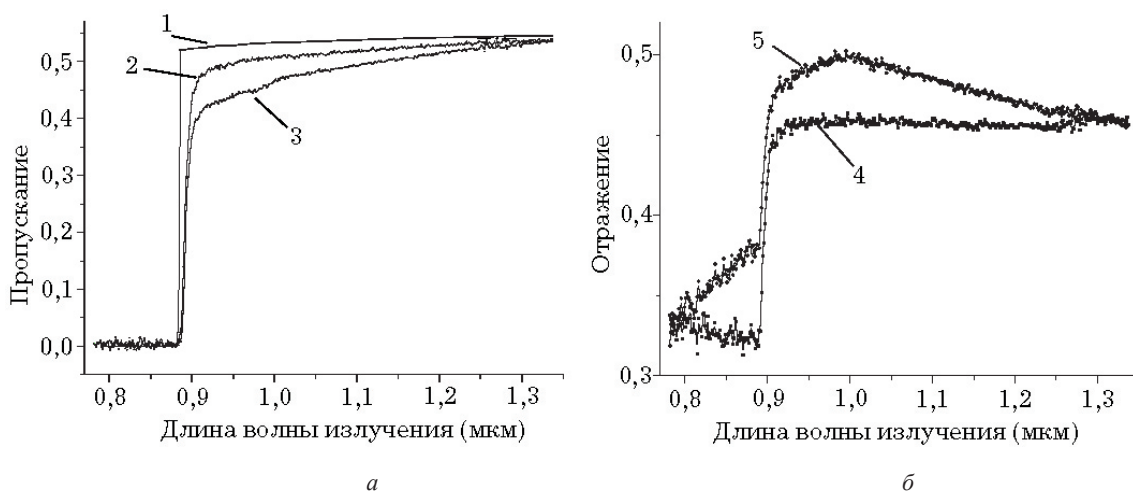


Рис. 1. *a* – спектр пропускания: 1 – подложка GaAs (рассчитана по данным [10]); 2 – подложка GaAs (эксперимент); 3 – гетероструктура на подложке (эксперимент); *б* – спектры отражения: 4 – подложка GaAs (эксперимент); 5 – гетероструктура на подложке (эксперимент)

*Fig. 1. (a)* transmission spectra: 1–transmission spectrum of the GaAs substrate calculated from the data of [10]; 2–experimental transmission spectrum of the GaAs substrate; 3–experimental transmission spectrum of the heterostructure on the substrate; (*b*) reflection spectra: 4–reflection spectrum of the GaAs substrate; 5–experimental reflection spectrum of the heterostructure on the substrate

Для определения оптических параметров исследуемой гетероструктуры необходимо учесть оптические параметры (известные) всех остальных слоев образца, т. е. в нашем случае подложки, но можно использовать и подложки с нанесенными слоями известных материалов.

Расчет коэффициентов пропускания и отражения выполнялся матричным методом [11], как это обычно делается для слоистых сред. В случае образца в виде тонкой пленки на относительно толстой подложке ( $\gg \lambda$ ) применение матричного метода имеет некоторые особенности:

Во-первых, в расчетах появляются выражения типа  $\cos h(\kappa h)$ , которые даже при относительно небольших коэффициентах экстинкции дают в результатах большие ошибки, а при его увеличении могут вывести из диапазона допустимых чисел. Одним из выходов в этой ситуации является переопределение функций  $\cos h(x) \rightarrow (1 + e^{-2x})/2$  и  $\sin h(x) \rightarrow (1 - e^{-2x})/2$  с послойным вынесением  $e^{-x}$  в числитель амплитуды пропускания.

Во-вторых, при расчете характеристик образца возникает трудность из-за использования недостаточно точных значений  $(n + i\kappa)$  в области поглощения [12]. На рис. 1, а показан спектр подложки GaAs (а) и он же, рассчитанный по справочным значениям [12] (рис. 1, б). Имеется существенное различие. Табличные данные для  $\kappa_{\text{GaAs}}$  при 300К имеются до уровня  $\sim 10^{-3}$ , ниже этих значений предполагается  $\kappa = 0$ . Для расчета характеристик подложки начиная с границы поглощения в область больших длин волн необходимо иметь более точные значения  $\kappa$  до уровня  $10^{-6}$ . К тому же они могут быть индивидуальны для каждой конкретной подложки.

В-третьих, в расчете возникает трудность, которую необходимо преодолевать в получении теоретических значений оптических характеристик, это интерференция, приводящая к большим флуктуациям сигналов из-за большой толщины подложки. Она преодолевается усреднением на участках, включающих достаточно много максимумов-минимумов рассчитываемой характеристики. Гладкость результирующей спектральной кривой при усреднении определяется видом применяемой аппаратной функции.

Последовательность действий в предлагаемой процедуре такова:

Предварительно измеряются коэффициенты пропускания  $T_{exp}(\lambda)$  и отражения  $R_{exp}(\lambda)$  подложки без гетероструктуры. Задав для подложки комплексный показатель преломления  $n_s(\lambda) + i\kappa_s(\lambda)$ , вычисляем для этих параметров коэффициенты пропускания  $T$  и отражения  $R$  и проводим поиск минимума целевой функции:

$$F = |T - T_{exp}| + |R - R_{exp}|.$$

Полученные значения  $n_s$  и  $\kappa_s$  дают значения  $T$  и  $R$  до уровня  $10^{-4}$ , соответствующие  $T_{exp}$  и  $R_{exp}$ . Для  $\kappa_s$  в области  $\lambda \geq 0,9$  мкм имеем уровень  $10^{-5} \div 10^{-6}$ .

После определения таким образом зависимости  $n_s$  и  $\kappa_s$  для подложки добавляем в расчет слой гетероструктуры с неизвестными параметрами  $n(\lambda)$  и  $\kappa(\lambda)$  и подгоняем, варьируя эти параметры, при помощи аналогичной целевой функции  $F$  до минимального расхождения с экспериментом.

На рис. 2 показаны результаты подгонки коэффициентов отражения и пропускания для гетероструктуры на подложке при минимизации целевой функции.

Определенные таким образом спектральные зависимости показателей преломления и коэффициентов экстинкции рассмотренной гетероструктуры показаны на рис. 3. В рамках данного эксперимента точность определения  $n(\lambda)$  и  $\kappa(\lambda)$  в основной области (0,92–1,0) мкм составляет для среднеквадратичных отклонений показателя преломления 0,006 и для коэффициента экстинкции 0,004.

Начало поглощения структуры находится вблизи 1,0 мкм, т. е. сдвинуто на 0,04 мкм от расчетного при использовании в расчете параметров объемного твердого раствора, что, по-видимому, объясняется напряженным характером слоев ям. Небольшой пик в  $\kappa$  вблизи 0,97 мкм можно объяснить наличием квазидвумерного экситона. При  $\lambda \geq 1$  мкм поглощение довольно резко спадает, и увеличивается ошибка в выделении  $\kappa$  из спектров, некоторые значения даже

выходят в нефизичную область  $k < 0$ , что объясняется малыми значениями поглощения в этой части спектра. В то же время значения показателя преломления определяются во всей области с хорошей точностью и существенно превышают значения, определенные линейной интерполяцией из  $n_{GaAs}$  и  $n_{InAs}$ , исходя из табличных значений этих параметров [12] и их долей в составе гетероструктуре.

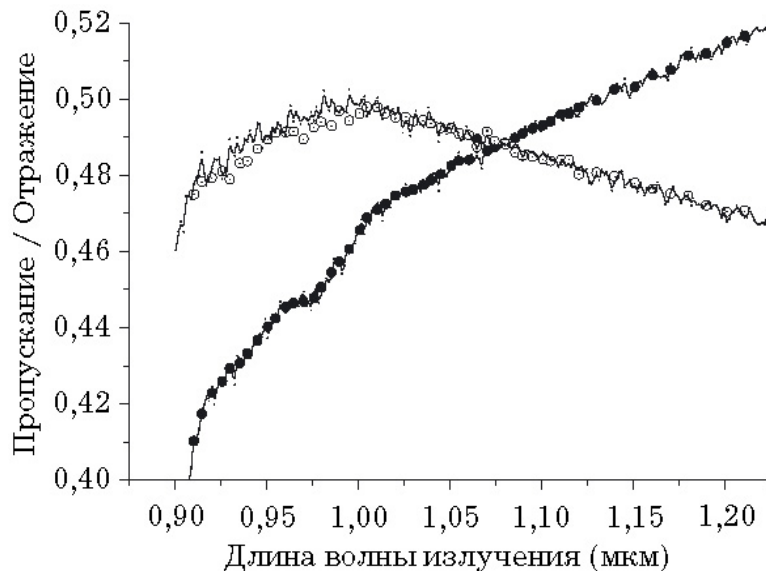


Рис. 2. Сравнение расчетных спектров пропускания (темные точки) и отражения (светлые точки) образца с экспериментальными спектрами (тонкие линии)

Fig. 2. Comparison of the calculated transmission (dark dots) and reflection (light dots) spectra of the heterostructure with quantum wells with the experimental spectra (thin lines)

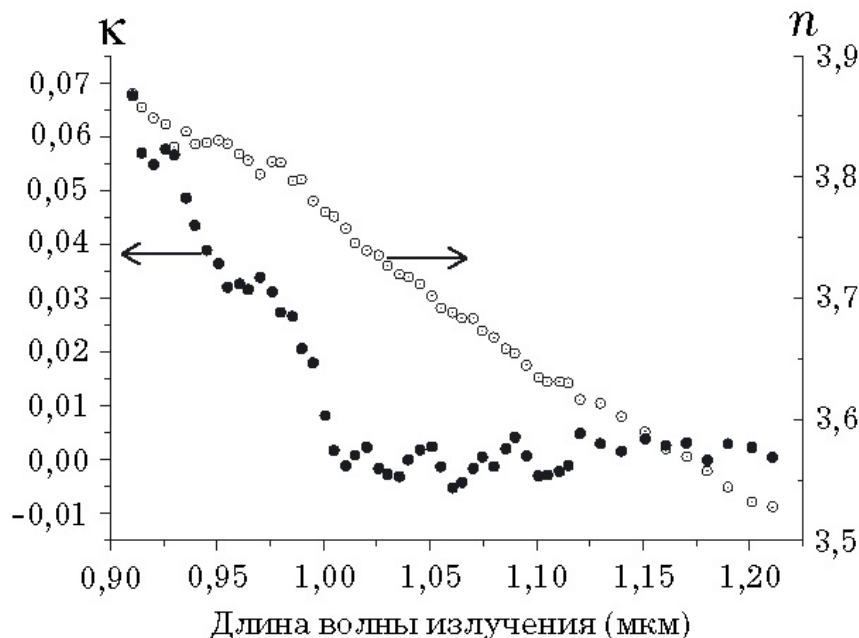


Рис. 3. Спектры показателя преломления  $n$  и коэффициента экстинкции  $k$  для гетероструктуры; на кривой  $k(\lambda)$  в области спектра  $0,97$  мкм виден экситонный вклад

Fig. 3. Spectra of refractive index  $n$  and extinction  $k$  for the heterostructure; on the curve  $k(\lambda)$  in the region of the spectrum  $\lambda = 0.97 \mu\text{m}$  one can see a peak corresponding to the exciton contribution

## Обсуждение

В работе исследована гетероструктура небольшой протяженности (0,054 мкм), имеющая спектр поглощения вблизи края поглощения подложки. Использование соотношений Крамерса–Кронига [7, с. 229–230], [8, с. 389–392] в данном случае (пленка на подложке) невозможно, так как нельзя определить  $\kappa(\lambda)$  из  $T(\lambda)$  в области  $\lambda < 0,9$  мкм, а вклад этой области в результат интегрирования очень значителен. Использование  $\kappa(\lambda)$  для определения  $n(\lambda)$  в общем случае имеет принципиальные недостатки даже для толстых полупроводниковых образцов, так как необходим учет  $\kappa(\lambda)$  в широкой области спектра, а вклад от далеких участков, хотя он и мал, но, благодаря широкой области, должен учитываться экстраполяцией [7], что может дать большую ошибку для реальных образцов.

Примененный в работе способ определения оптических параметров тонкой пленки на толстой подложке имеет свои особенности, связанные в основном с подложкой. Это особенно существенно для полупроводниковых гетероструктур на соответствующих подложках и менее существенно для диэлектрических комбинаций.

Более толстые пленки могут улучшить результат определения  $n(\lambda)$  и  $\kappa(\lambda)$ . Также оптимизация процесса измерений (спектральное разрешение, источник и приемник излучения) в перспективе могут уменьшить шум и повысить точность измерений в область  $10^{-4}$ .

В расчетной области важна дискретизация по  $\lambda$  (шаги в вычислении  $R$  и  $T$ , ширина аппаратной функции при усреднении), ориентируясь на экспериментальную кривую. На этапе получения результатов использовалась аппаратная функция прямоугольного профиля, оставляющая в теоретических кривых шумовую составляющую от интерференции. В случае гауссовой аппаратной функции, более соответствующей эксперименту, кривая свободна от этих шумов.

Выбор двух экспериментальных характеристик  $R$  и  $T$  при нормальном падении является наиболее простым, но не единственным. Можно использовать различие характеристик при различных углах падения на образец для  $s$  и  $p$  поляризации падающих пучков. Но метод определения  $n$  и  $\kappa$  изучаемой пленки минимизацией расхождения эксперимента и расчета для двух измеряемых параметров достаточно универсален.

Проведенный модельный расчет с введением переходных слоев между барьером и ямой в гетероструктуре размером (1-2) монослоя, возможных для эпитаксиального роста, показывает незначительное отклонение от теоретических значений  $R$  и  $T$ .

Для учета более широких диффузных границ можно предложить введение третьего, помимо  $n$  и  $\kappa$ , параметра в некоторой модели и, соответственно, ввести третью измеряемую характеристику, например, коэффициент отражения для  $p$  поляризации при фиксированном угле падения. Результат получается при минимизации соответствующей целевой функции по трем параметрам. В этом случае важно задать начальные параметры в поиске, приводящие к минимуму однозначно.

Кривые  $n(\lambda)$  и  $\kappa(\lambda)$  не носят универсального характера и соответствуют параметрам полупроводниковой сверхрешетки с приведенными величинами толщин барьеров, ям и количеством периодов. Изменение любого из этих параметров может привести к существенным изменениям в спектре, так как изменится положение и ширина сверхрешеточных мини-зон, ответственных за поглощение и, следовательно, за преломление. Полученные зависимости необходимы для проектирования более сложных многослойников, включающих данную структуру.

## Выводы

Предложенный метод использует одновременно полученные из эксперимента спектры отражения и пропускания тонкой пленки-гетероструктуры, выращенной на достаточно толстой кристаллической подложке. Он позволяет извлечь спектры  $n(\lambda)$  и  $\kappa(\lambda)$ . В этом случае из-за невозможности убиранья подложки этот метод предпочтительнее подхода, основанного на из-

влечении параметра  $k(\lambda)$  из спектра пропускания с последующим определением  $n(\lambda)$  по соотношению Крамерса–Кронига, требующего знания спектра пропускания в широкой спектральной области, но имеет свои особенности, обусловленные вкладом в измеряемые спектры от подложки.

### Список литературы

1. **Swanepoel R.** Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon // *J. Phys. E: Sci. Instrum.* 1983. 16. P. 1214–1222.
2. **Jena S., Tokas R. B., Thakur S. and Udup D. V.** PRISA: a user-friendly software for determining refractive index, extinction co-efficient, dispersion energy, band gap, and thickness of semiconductor and dielectric thin films // *Nano Express.* 2021. 2. P. 010008 (13p).
3. **Leung M. M. Y., Djuris'ic' A. B., and Li E. H.** Refractive index of InGaN/GaN quantum well // *Journal of Applied Physics.* 1998. 84. P. 6312–6317.
4. **Adachi S.** Optical properties of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As alloys // *Phys. Rev. B.* 1988. P. 12345.
5. **Guo Q., Kato O., Fujisawa M., and Yoshida A.** Optical constants of indium nitride // *Solid State Communications.* 1992. 83. P. 721–723.
6. **Cheung S. K., Wang H., Huang W., and Jain F.** Optical characterization of InGaAs–GaAs multiple quantum wells using variable angle spectroscopic ellipsometry for designing tunable modulators // *Appl. Phys.* 1997. 81. P. 497–501.
7. **Кардона М., Петер Ю.** Основы физики полупроводников. М.: Физматлит. 2002. 560 с.
8. **Ландау Л., Лифшиц Е.** Электродинамика сплошных сред. М.: Наука. 1982. 620 с.
9. **Buffeteau T., Desbat B.** Thin-Film Optical Constants Determined from Infrared Reflectance and Transmittance Measurements // *Appl. Spectroscopy.* 1989. 43. P. 1027–1032.
10. **Ковалёв А. А.** Измерение спектра отражения в однолучевой схеме // *ПТЭ.* 2020. № 6. С. 53–56.
11. **Борн М., Вольф Э.** Основы оптики. М.: Наука, 1973. 720 с.
12. **Adachi S.** Optical Constants of Crystalline and Amorphous Semiconductors. Kluwer Academic Publishers, 1999. 736 p.

### References

1. **Swanepoel R.** Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon. *J. Phys. E: Sci. Instrum.*, 1983, vol. 16, pp. 1214–1222.
2. **Jena S., Tokas R. B., Thakur S., Udup D. V.** PRISA: a user-friendly software for determining refractive index, extinction co-efficient, dispersion energy, band gap, and thickness of semiconductor and dielectric thin films. *Nano Express*, 2021, vol. 2, 010008.
3. **Leung M. M. Y., Djuris'ic' A.B., Li E. H.** Refractive index of InGaN/GaN quantum well. *Journal of Applied Physics*, 1998, vol. 84, pp. 6312–6317.
4. **Adachi S.** Optical properties of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As alloys. *Phys. Rev. B.*, 1988, 12345.
5. **Guo Q., Kato O., Fujisawa M., Yoshida A.** Optical constants of indium nitride. *Solid State Communications*, 1992, vol. 83, pp. 721–723.
6. **Cheung S. K., Wang H., Huang W., Jain F.** Optical characterization of InGaAs–GaAs multiple quantum wells using variable angle spectroscopic ellipsometry for designing tunable modulators. *Appl. Phys.*, 1997, vol. 81, pp. 497–501.
7. **Yu Peter Y., Cardona Manuel** Fundamentals of Semiconductors. Springer. 2002. 560 p.
8. **Kovalyov A. A.** Measuring the Reflective Spectra in a One-Beam Scheme. *Instruments and Experimental Techniques*, 2020, vol. 63, pp. 55–58.
9. **Born Max and Wolf Emil** Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light. Cambridge University Press, 1999. 952 p.

10. **Adachi S.** Optical Constants of Crystalline and Amorphous Semiconductors. Kluwer Academic Publishers, 1999. 736 p.

### **Информация об авторе**

**Ковалёв Александр Анатольевич**, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник ИФП СО РАН

### **Information about the Author**

**Alexander A. Kovalyov**, Dr. of Phys.-Math. Sc., ISP SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

*Статья поступила в редакцию 19.10.2022; одобрена после рецензирования 17.01.2023;  
принята к публикации 17.01.2023*

*The article was submitted 19.10.2022; approved after reviewing 17.01.2023;  
accepted for publication 17.01.2023*