

На правах рукописи

Гордеева Анастасия Борисовна

**Оптическая анизотропия поверхностей (001) GaAs и InAs**

специальность

01.04.10 - физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-Техническом институте им. А.Ф. Иоффе Российской Академии Наук.

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, **Берковиц Владимир Леонидович**, ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией, **Сейсян Рубен Павлович**, ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе

кандидат физико-математических наук, доцент, **Тарасов Сергей Анатольевич**, ФГБОУ Санкт-Петербургский Государственный Электротехнический университет "ЛЭТИ" им. В.И. Ульянова-Ленина.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения РАН

Защита состоится «19» декабря 2013 г. в 10.00 часов на заседании диссертационного совета Д 002.205.02 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-Техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН по адресу 194021 Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБУН Физико-Технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

Автореферат разослан «14» ноября 2013 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, направлять по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 002.205.02,  
доктор физико-математических наук



Я.М. Сорокин

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность работы

Поверхности полупроводниковых кристаллов  $A^3B^5$  обнаруживают широкое разнообразие оптических и электронных свойств, которые определяются кристаллографической ориентацией и структурой поверхности, ее химическим составом, способами получения, природой, типом и количеством адсорбированных чужеродных атомов. Совокупность соответствующих знаний составляет важный раздел физики поверхности и имеет также очевидную практическую значимость, поскольку эффективность приборных структур полупроводниковой электроники определяется главным образом свойствами поверхностей и границ раздела используемых в них материалов. Интерес к изучению свойств поверхностей соединений  $A^3B^5$  и интерфейсов на их основе диктует необходимость создания, развития и применения новых исследовательских методик. Оптические методы, в отличие от традиционно используемых методов электронной фотоэмиссии и дифракции электронов, характеризуются высокой чувствительностью и спектральным разрешением, а также минимальным воздействием на исследуемую поверхность. Одним из таких методов является спектроскопия анизотропного отражения (АО). Этот метод был специально разработан для исследований поверхности кубических кристаллов, он позволяет регистрировать слабый оптический отклик от внешних атомных слоев поверхности, отделяя его от гораздо более интенсивного оптического отклика объема кристалла. Существенным преимуществом данного метода является возможность применения его при исследовании образцов *in-situ* в газовой или жидкой среде.

В настоящей работе спектроскопия АО использовалась для исследования поверхностей (001) полупроводниковых кристаллов  $A^3B^5$  - арсенида галлия и арсенида индия. Эти соединения активно используются при создании полупроводниковых микро и нано - структур для оптоэлектронных приборов, работающих в средней и ближней инфракрасной области спектра, приборов фотовольтаики, быстродействующих электронных приборов. Поэтому исследование поверхностей этих соединений и формируемых на их основе границ раздела оптическим методом спектроскопии АО, безусловно, является актуальным.

В последние годы, с использованием методики спектроскопии АО было выполнено большое количество исследований атомарно-чистых реконструированных поверхностей (001) полупроводниковых кристаллов  $A^3B^5$ . При этом, в частности, были установлены спектры АО, соответствующие основным типам реконструкций чистых поверхностей (001) GaAs и InAs. В данной работе изучались атомарно-чистая поверхность GaAs(001), а также естественно окисленные поверхности (001) GaAs и InAs. Такой подход позволил, с одной стороны, решить фундаментальные проблемы оптики поверхности, такие как определение природы оптических переходов, наблюдаемых в спектрах АО чистой поверхности GaAs(001), установление

механизмов, определяющих форму и ширину соответствующих спектральных особенностей, выяснение причин возникновения оптической анизотропии в приповерхностных слоях кубических кристаллов. С другой стороны, проводимые исследования позволили восполнить отсутствующие представления о составе и структуре областей кристаллов GaAs и InAs вблизи интерфейса кристалл/окисел, о проявлениях механических напряжений в оптических спектрах. Актуальность решения таких задач не вызывает сомнений.

**Цель данной работы** состояла в получении новых фундаментальных знаний об электронной структуре и оптических свойствах атомарно-чистых поверхностей GaAs(001) со структурой (2x4) и (4x2), а также в изучении оптических свойств естественно-окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs и установлении причин и механизмов, ответственных за оптическую анизотропию таких поверхностей.

Для достижения данной цели в работе предполагалось:

1. Выполнить исследования спектров АО чистой, обогащенной мышьяком поверхности GaAs(001)(2x4) в условиях адсорбции кислорода и определить природу спектральных особенностей в спектре АО такой поверхности.
2. Исследовать модификацию спектров АО обогащенной галлием поверхности GaAs(001)(4x2) при изменении температуры в диапазоне 90К-680К и оценить параметры электрон-фононного взаимодействия для оптического перехода на такой поверхности, проявляющегося в спектре АО в области 2-2.7 эВ.
3. Провести исследование спектров АО естественно-окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs и установить причины и механизмы, ответственные за оптическую анизотропию таких поверхностей.
4. Исследовать влияние одноосного давления в направлениях {110} на спектры АО поверхностей (001) GaAs и InAs. Установить природу спектрально-независимого вклада в спектры АО окисленных поверхностей GaAs(001) сильно легированных кристаллов.

**Научная новизна работы** определяется использованием новых подходов к решению поставленных задач, получением новых экспериментальных результатов и развитием новых представлений.

1. Для установления природы оптических переходов на атомарно-чистой поверхности GaAs(001)(2x4) был предложен новый экспериментальный подход, состоящий в исследовании модификаций спектра АО этой поверхности в условиях адсорбции кислорода. В результате использования такого подхода была установлена природа электронных переходов, соответствующих основным особенностям в спектре АО поверхностей GaAs(001)(2x4).
2. Выполнены теоретические и экспериментальные исследования температурной зависимости положения и ширины особенности вблизи 2.2 эВ в спектре АО поверхности GaAs(001)(4x2),

соответствующей электронному переходу с участием состояния на димере галлия. В работе показано, что модификация спектра обусловлена наличием сильного электрон-фононного взаимодействия на такой поверхности.

3. В работе впервые установлена причина оптической анизотропии естественно-окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs. Показано, что анизотропия этих поверхностей связана с наличием на интерфейсе кристаллического слоя атомов избыточного мышьяка, имеющих анизотропную конфигурацию валентных связей.
4. Впервые установлено, что приложение одноосного давления в направлениях  $\{110\}$  к кристаллам GaAs и InAs вызывает появление в спектрах АО поверхности (001) спектрально-независимого сигнала, амплитуда которого прямо пропорциональна амплитуде давления, а знак определяется направлением приложенного давления. На основе полученных экспериментальных данных разработан метод оптической характеристики наличия одноосных механических напряжений в приповерхностных областях кристаллов GaAs(001) и InAs(001).
5. Определена природа спектрально-независимого сигнала, присутствующего в спектрах АО поверхностей (001) сильно легированных образцов GaAs. Этот сигнал связан с электрическим полем в слое объемного заряда у поверхности GaAs, направленным по нормали к поверхности. Создаваемое, вследствие обратного пьезоэлектрического эффекта, одноосное напряжение в плоскости поверхности является причиной обнаруживаемого спектрально-независимого сигнала.

**Практическую значимость** имеют следующие полученные в работе результаты.

В работе установлено, что одноосное давление приводит к появлению спектрально-независимого сигнала АО, амплитуда которого прямо пропорциональна амплитуде давления, а знак определяется направлением приложения давления. Этот эффект может быть использован для создания метода оптической диагностики внутренних напряжений в предельно-тонких приповерхностных слоях полупроводников  $A^3B^5$  или интерфейсов на их основе *in situ*, в процессе их роста, адсорбции посторонних атомов.

**Достоверность и надежность результатов** обусловлена в первую очередь уникально высокой чувствительностью используемой методики спектроскопии анизотропного отражения, позволяющей регистрировать сигналы  $\Delta R/R$  на уровне  $10^{-4}$ . Все эксперименты с чистыми поверхностями проводились в сверхвысоком вакууме на уровне  $10^{-10}$ - $10^{-11}$  Па. Для приготовления чистых поверхностей использовались хорошо апробированные методики контролируемого отжига в условиях сверхвысокого вакуума поверхностей GaAs, зарощенных мышьяком или обработанных в растворе HCl-IPA. Основные эксперименты неоднократно повторялись. Надежность результатов также подтверждается хорошим совпадением эксперимента и расчетов.

### **Апробация работы.**

Основные результаты работы были представлены на международной конференции «Оптика Полупроводников», Ульяновск, 2000г., 12 Всероссийской научной конференции студентов – физиков и молодых ученых, Новосибирск 2006г. (награждена дипломом I степени), международной конференции Optics of Surfaces and Interfaces VIII, Ischia, Italy 2009.

Результаты работы представлены на конкурсе ФТИ для молодых ученых в 2006г, в докладе «Оптическая спектроскопия поверхности GaAs (001)», работа награждена третьей премией.

**Публикации** Основные результаты диссертации опубликованы в 11 научных работах, из них 7 публикаций в ведущих рецензируемых изданиях, рекомендованных в перечне ВАК.

**Личный вклад автора** заключается в участии в анализе и интерпретации полученных результатов, в проведении расчетов и написании статей. Экспериментальные результаты, представленные в главе V, получены при непосредственном участии автора работы.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, и списка литературы из 95 наименований. Основной текст работы изложен на 104 страницах, включает в себя 2 таблицы и 37 рисунков.

### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Особенность в спектре анизотропного отражения поверхности GaAs(001)(2x4) вблизи 2.9 эВ обусловлена совокупностью электронных переходов на поверхности и в приповерхностной области объема кристалла. Спектральная особенность, расположенная около 2.4 эВ, обусловлена переходами на поверхности.
2. Особенность в спектре анизотропного отражения атомарно-чистой поверхности GaAs(001)(4x2) вблизи 2.5 эВ, с повышением температуры от 90 до 645К уширяется и сдвигается в меньшие энергии. Эти эффекты объясняются наличием сильного электрон-фононного взаимодействия на поверхности. Среднее значение энергии поверхностного фонона составляет 10 мэВ.
3. Одноосное давление в направлениях {110} вызывает появление спектрально-независимого сигнала в спектрах анизотропного отражения поверхностей (001) GaAs и InAs, амплитуда которого прямо пропорциональна давлению. Коэффициент пропорциональности составляет  $2.1 \cdot 10^{-5}$  МПа<sup>-1</sup> для GaAs и  $1.8 \cdot 10^{-5}$  МПа<sup>-1</sup> для InAs. Для давления в направлении [110] знак сигнала положительный, для давления в направлении  $[\bar{1}10]$  - и отрицательный.
4. Оптическая анизотропия окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs обусловлена наличием на интерфейсе кристалл/окисел кристаллического слоя атомов мышьяка с анизотропной конфигурацией связей и механическим напряжением в приповерхностной области кристалла.

5. В спектрах анизотропного отражения поверхностей (001) сильно легированных образцов GaAs присутствует спектрально независимый сигнал, возникающий вследствие обратного пьезоэлектрического эффекта, вызываемого в GaAs, электрическим полем в слое объемного заряда у поверхности. Знак сигнала отрицательный для n- типа легирования и положительный для p- типа.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Введение** содержит обоснование актуальности исследования, формулировку цели и задач работы. В этом разделе производится оценка научной новизны и практической ценности работы.

**В первой главе** представлен обзор данных о структуре атомарно-чистой поверхности GaAs(001). В части 1.2 приводятся модели элементарных ячеек, соответствующих различным типам реконструкции этой поверхности. Данные о напряжениях, возникающих в приповерхностной области кристалла вследствие реконструкции слоя атомов поверхности приводятся в части 1.3.

**Во второй главе** подробно описывается используемая в данной работе оптическая модуляционная методика - спектроскопия анизотропного отражения, принцип работы которой разбирается в части 2.1. Эта методика измеряет спектральную зависимость сигнала АО, который представляет собой нормированную разность коэффициентов отражения нормально падающего на поверхность света, линейно поляризованного вдоль направлений взаимно-ортогональных осей поверхности. Для поверхности сигнал АО равен:

$$\Delta R / R = 2 \frac{R_{[\bar{1}10]} - R_{[110]}}{R_{[\bar{1}10]} + R_{[110]}} \quad (1)$$

В части 2.2 рассматриваются возможные причины оптической анизотропии, проявляющейся в спектрах АО кубических полупроводников  $A^3B^5$ , приводятся теоретические выражения, позволяющие связать анизотропию диэлектрической проницаемости и величину сигнала АО. В части 2.3 приводятся известные спектры АО атомарно-чистой поверхности GaAs(001), обогащенной мышьяком со структурами  $c(4 \times 4)$  и  $(2 \times 4)$ , и поверхности, обогащенной галлием, с реконструкциями  $(4 \times 2)/c(8 \times 2)$  и  $(6 \times 6)$ . Здесь также дается краткий обзор основных теоретических моделей и примеры расчетов из первых принципов спектров АО чистых поверхностей GaAs(001) и соответствующих электронных состояний на этих поверхностях.

**Третья глава** посвящена описанию методики экспериментов. В ней приводятся схема установки (часть 3.1), используемой для регистрации спектров АО, схема приложения одноосного давления к образцам (часть 3.2), и описывается процедура получения атомарно-чистой поверхности GaAs(001) (часть 3.3).

**Четвертая глава** содержит результаты исследований атомарно-чистых поверхностей GaAs(001) с реконструкциями (2x4) и (4x2) методом спектроскопии АО.

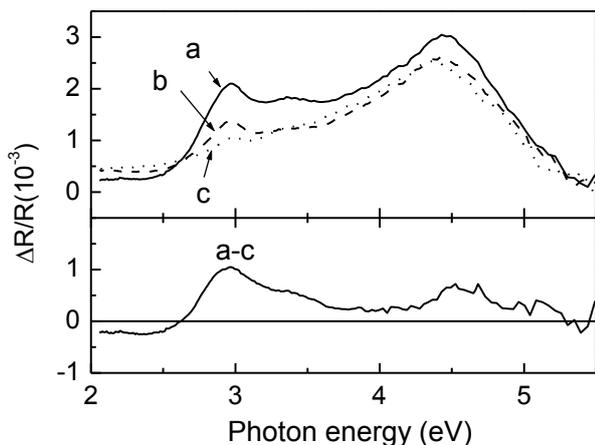


Рис. 1.1. Спектры АО поверхности GaAs(100)(2x4), измеренные после следующих экспозиций кислорода: (a) – 0 Лэнгмюр, (b) –  $2.4 \cdot 10^3$  Лэнгмюр, (c) –  $3.3 \cdot 10^4$  Лэнгмюр. В нижней части показан спектр, полученный при вычитании спектра (c) из спектра (a).

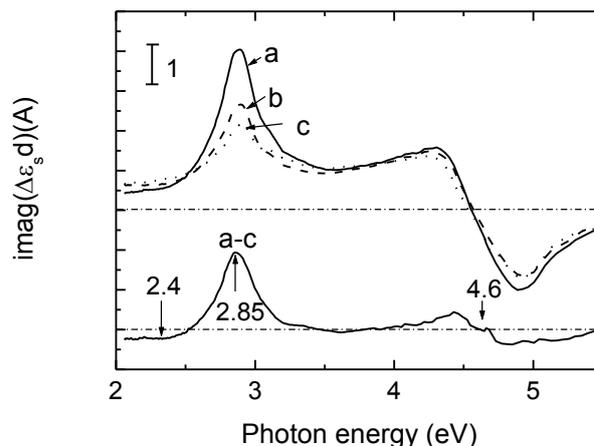


Рис. 1.2. Спектры мнимой части анизотропии диэлектрической проницаемости поверхности GaAs(100)(2x4) полученные при окислении. Спектры (a), (b), (c) соответствуют преобразованным спектрам АО (a), (b), (c) на рис. 1.1.

Часть 4.1 данной главы посвящена исследованию поверхности GaAs(001), обогащенной мышьяком с реконструкцией (2x4). Задача этого исследования состояла в том, чтобы экспериментально определить природу оптических переходов, наблюдаемых в спектре АО такой поверхности. На рис.1.1 представлен спектр АО поверхности GaAs(001)(2x4) (спектр a), который состоит из двух широких особенностей, расположенных при энергиях 2.9 эВ и 4.4 эВ, вблизи оптических переходов  $E_1$ ,  $E_1 + \Delta_1$  и  $E_0$  в объеме GaAs. Такое совпадение может свидетельствовать о том, что обе наблюдаемые особенности обусловлены оптическими переходами в приповерхностной области объема кристалла. В то же время, эти особенности также могут быть связаны с оптическими переходами на поверхности. Основным элементом реконструкции (2x4) является димер мышьяка, ориентированный в направлении  $[\bar{1}10]$ . Оптический переход с участием состояний на таком димере, очевидно, должен быть поляризован вдоль того же направления и проявляться в спектре АО в виде положительной линии. Для экспериментального определения природы данных спектральных особенностей исследовались модификации спектра АО чистой поверхности GaAs(001)(2x4), обусловленные адсорбцией атомарного кислорода. Атомы кислорода образуют связи с атомами галлия поверхности, связи между атомами димера мышьяка и подложки при этом разрываются. Следовательно, линии в спектре АО связанные с оптическими переходами на поверхности, в результате адсорбции атомарного кислорода должны сильно модифицироваться (в простейшем случае – исчезать).

Спектры b и c на рис.1.1 измерены после адсорбции кислорода на поверхность GaAs(001)(2x4). Можно видеть, что адсорбция кислорода оказывает наибольшее влияние на спектральную особенность вблизи 2.9 эВ, в то же время особенность вблизи 4.4 эВ практически не изменяется.

Для удобства анализа обнаруженных изменений спектры АО, представленные на рис.1.1, были преобразованы в спектры анизотропии мнимой части диэлектрической проницаемости поверхностного слоя, с использованием выражения:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{8\pi L}{\lambda} \operatorname{Im} \left[ \frac{\Delta \varepsilon}{\varepsilon_b - 1} \right], \quad (2)$$

где  $\lambda$  – длина волны света,  $L$  – толщина слоя,  $\varepsilon_b$  – диэлектрическая проницаемость GaAs,  $\Delta\varepsilon$  – анизотропия диэлектрической проницаемости слоя атомов поверхности. В пересчитанных спектрах, показанных на рис.1.2, форма особенностей проявляется более четко. Можно утверждать, что в спектре (с), соответствующем максимальной дозе адсорбированного кислорода, сохраняются спектральные особенности, обусловленные преимущественно переходами в приповерхностной области кристалла. В то же время, в спектре (а-с), полученном в результате вычитания спектра (с) из спектра (а) присутствуют только особенности, которые пропадают в результате адсорбции кислорода. На основании сравнения спектров (с) и (а-с) был сделан следующий вывод о природе спектральных особенностей, наблюдаемых в спектре АО чистой поверхности GaAs(001) (2x4). Особенности, связанные с электронными переходами на поверхности проявляются вблизи 2.4 эВ и 2.85 эВ. В то же время, особенности вблизи 2.9 эВ и 4.6 эВ обусловлены анизотропным поглощением в приповерхностной области кристалла. Таким образом, широкая линия вблизи 2.9 эВ оказывается состоящей из суммы двух линий, имеющих различную природу.

Часть 4.2 посвящена исследованию оптических переходов на обогащенной галлием чистой поверхности GaAs(001) (4x2) и оценки параметров электрон-фононного взаимодействия. Экспериментально изучались модификации спектра АО такой поверхности, обусловленные изменением температуры в диапазоне 90К-680К. Полученные спектры представлены на рис.2.1. В спектрах доминирует отрицательная особенность вблизи 2.5 эВ. Согласно расчетам [1], она связана с оптическим переходом, конечное состояние которого преимущественно локализовано на димере галлия. Такой димер, ориентированный в направлении [110], является основным элементом реконструкции (4x2). При температуре 90К спектральная особенность вблизи 2.5 эВ может быть представлена в виде двух отдельных линий: основной на 2.3 эВ и дополнительной на 2.7 эВ (см. вставку на рис.2.1). С увеличением температуры линии становятся неразличимы, вся

особенность сдвигается в меньшие энергии и уширяется. Причиной этих изменений является электрон-фононное взаимодействие.

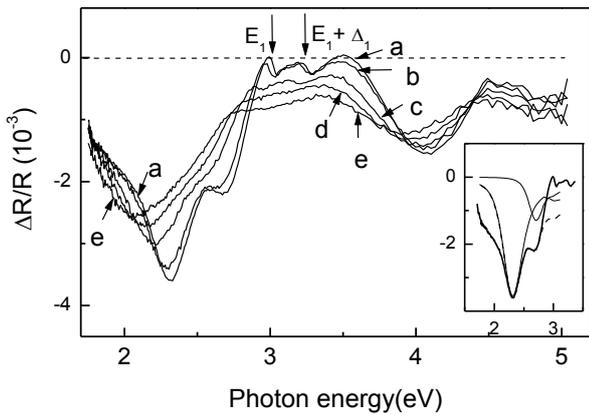


Рис. 2.1. Спектры АО поверхности GaAs(100), обогащенной галлием, измеренные при температурах: 90 К (а), 130 К (b), 300 К (c), 500 К (d), and 680 К (e). Отмечены положения линий объемных переходов соответствуют 90 К. На вставке показано разложение спектра (а) .

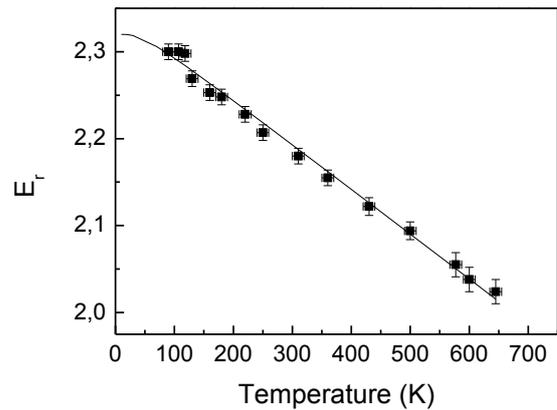


Рис. 2.2 Зависимость положения экстремума спектральной зависимости величины  $(\lambda \cdot \Delta R/R)$  от температуры. Экспериментальные точки (черные квадраты), линии – расчет при  $\hbar\omega_0=0.01$  eV.

Оценку параметров электрон-фононного взаимодействия для исследуемого электронного перехода можно произвести, воспользовавшись выражением (2), определяющим связь между сигналом АО и анизотропией диэлектрической проницаемости. Согласно [1], исследуемая особенность связана с электронным переходом, конечное состояние которого является преимущественно локализованным на димере галлия. Поэтому, было сделано предположение о наличии сильного электрон-фононного взаимодействия для данного перехода. При выполнении расчета спектров также предполагалось, что оптическая анизотропия определяется анизотропией дипольного момента оптического перехода, максимального в направлении связи в димере галлия [110]. В этом случае спектральная зависимость величины  $\Delta\epsilon$  может быть вычислена с учетом сильного электрон-фононного взаимодействия при использовании выражений, представленных в главе 5 монографии [2].

Для оценки среднего значения энергии колебательных мод, взаимодействующих с исследуемым электронным переходом, был выполнен анализ смещения положения экстремума в спектре  $(\lambda \cdot \Delta R/R)$  с ростом температуры. Согласно выражению (2), положение экстремума в этом спектре совпадает с положением экстремума в спектре мнимой части  $\Delta\epsilon$ , в случае, когда оптический переход находится вне областей оптического поглощения в объеме GaAs. Экспериментальная зависимость положения экстремума в спектре  $(\lambda \cdot \Delta R/R)$  от температуры показана точками на рис.2.2. Известно, что смещение линии оптического поглощения с ростом температуры пропорционально равновесному числу фононов в основном состоянии. Такая зависимость была рассчитана с использованием значения энергии фонона  $\hbar\omega_0$ , как параметра, и

показана сплошной линией. Значение энергии  $\hbar\omega_0$ , обеспечивающее наилучшее совпадение расчета и экспериментальных точек составляет  $0.01 \pm 0.002$  эВ.

Далее, в части 4.2 приведены расчеты формы спектров АО при разных температурах. Спектральная особенность вблизи 2.5 эВ была аппроксимирована двумя линиями типа Фойгта во всем температурном диапазоне 90К-680К. При расчетах предполагалось, что основное и возбужденное состояния взаимодействуют с несколькими фононными модами, которые характеризуются средним значением энергии  $\hbar\omega_0$ , N- число таких мод. Сила электрон-фононного взаимодействия определяется фактором Хуанга-Рис – S, параметр уширения спектральной линии не зависящий от температуры  $\gamma$ . Наилучшее совпадение рассчитанных и экспериментальных спектров АО было получено при использовании следующих значений параметров N·S: для основной линии  $N \cdot S_1 = 39$ ,  $\gamma_1 = 0.16$  эВ, для дополнительной линии  $N \cdot S_2 = 27$ ,  $\gamma_2 = 0.08$  эВ. Данные оценки подтверждают наличие сильного электрон-фононного взаимодействия для исследуемого оптического перехода.

**В пятой главе** представлены результаты исследования естественно окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs. В части 5.1 дается краткое описание эффектов локального поля и их проявлений в оптической спектроскопии кристаллов. В части 5.2 приводятся экспериментально измеренные спектры АО естественно окисленных поверхностей (001) полупроводников GaAs и InAs и предлагаются модели атомной структуры интерфейсов полупроводник/окисел.

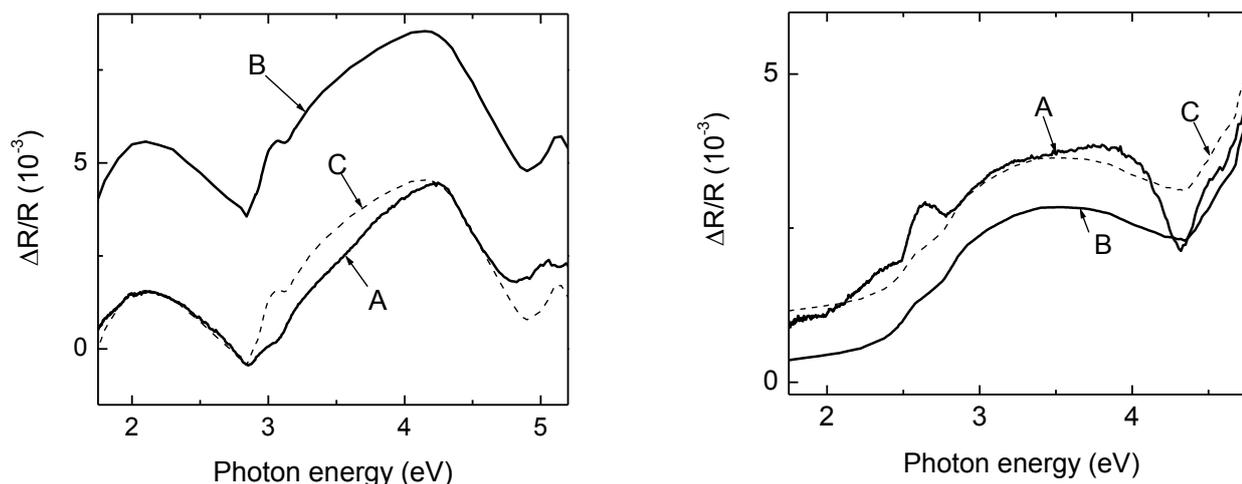


Рис. 3 Спектры АО естественно окисленных поверхностей (001) GaAs (правая панель) и InAs (левая панель): А – экспериментальный, В – рассчитанный с использованием выражений (5.4 – 5.11), С – суперпозиция спектра В и постоянного сигнала равного  $4 \cdot 10^{-3}$  для GaAs и  $0.8 \cdot 10^{-3}$  для InAs.

Окисленные поверхности (001) GaAs и InAs обладают характерными спектрами АО в широком спектральном интервале 1.5-6 эВ (см. рис.3, кривые А). Причина такой анизотропии не очевидна, поскольку как объем кубического кристалла, так и слой аморфного окисла являются

оптически изотропными. Поэтому, единственной причиной оптической анизотропии окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs может быть присутствие на интерфейсе между окислом и объемом полупроводника анизотропного кристаллического слоя. Как известно, на поверхности кристаллов GaAs и InAs под слоем окисла обнаруживается т.н. избыточный мышьяк [3]. Для объяснения оптической анизотропии мы предположили, что атомы такого мышьяка на поверхности GaAs под слоем окисла могут образовать двойной кристаллический слой, аналогом которого является реконструкция атомарно-чистой поверхности GaAs(001)c(4x4). На поверхности InAs такой слой образоваться не может из-за большой разности ковалентных радиусов атомов As и In.

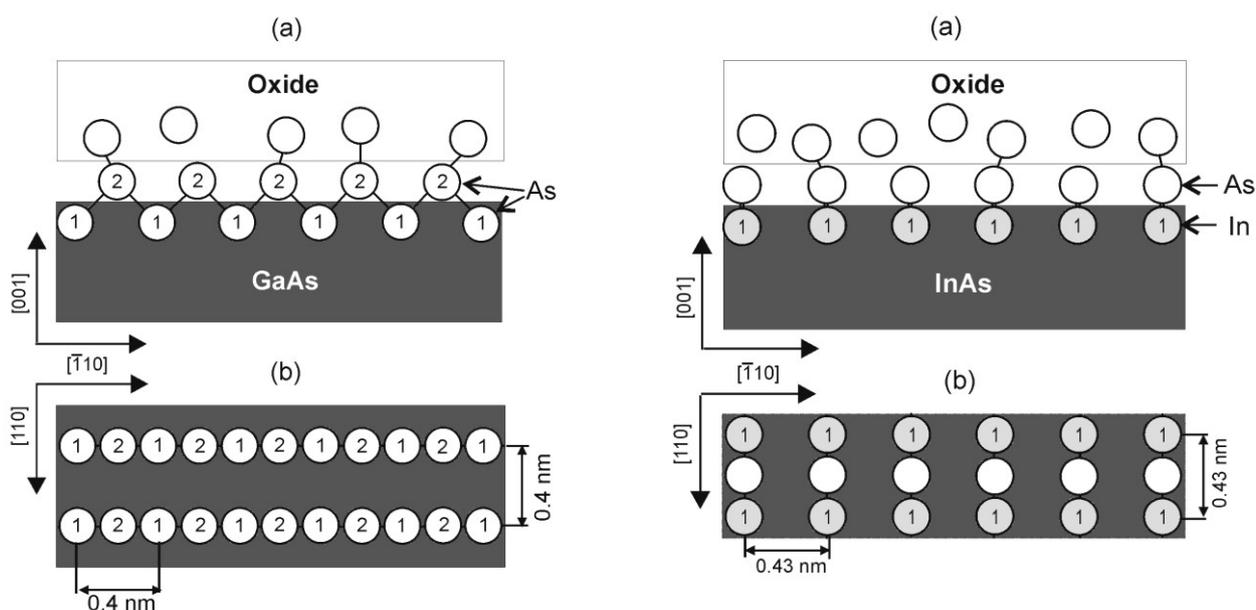


Рис. 4 Модели интерфейсов GaAs(001)/окисел (левая панель) и InAs(001)/окисел (правая панель). Вид сбоку – (a), вид сверху на интерфейс под слоем окисла – (b).

На рис. 4 представлены предполагаемые атомные модели таких интерфейсов. Связи между слоем атомов избыточного мышьяка интерфейса и подлежащего слоя атомов кристалла строго ориентированы в направлении  $[\bar{1}10]$  в случае GaAs и в направлении  $[110]$  в случае InAs. В тоже время, связи таких атомов с вышележащим слоем ориентированы хаотически. Таким образом, атомы мышьяка интерфейсного слоя имеют анизотропную конфигурацию валентных связей, что и является основной причиной обнаруженной оптической анизотропии.

В части 5.3 представлены результаты расчета спектров АО окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs с использованием структурных моделей показанных на рис. 4. При расчетах атомы мышьяка слоя интерфейса рассматривались как точечные оптические диполи с анизотропной поляризуемостью. Считалось, что диполи находятся в слое окисла, вблизи границы раздела кристалл/окисел. Расчет спектров АО выполнен в рамках классической электродинамики с учетом

эффектов локального поля. Используемые для расчета спектра АО выражения представлены в работе [4]. Параметры, при использовании которых достигается наилучшее совпадение формы рассчитанных и экспериментальных спектров приводятся в таблице I. Спектры АО, рассчитанные с использованием указанных параметров, показаны на рис. 3 (спектры В).

Таблица I

	$a$ (Å)	$\chi^{(x)}$ (Å <sup>3</sup> )	$\chi^{(y)}$ (Å <sup>3</sup> )	$h$ (Å)	$L$ (Å)
GaAs	4	8	4	0.66	2.5
InAs	4.28	3	8	1	2.5

Здесь  $\chi^{(\alpha)}$ -поляризуемость диполя в направлении  $\alpha$ ,  $h$ - расстояние от слоя диполей до границы раздела кристалл/окисел,  $L$ -толщина окисла,  $a$ - межатомное расстояние в слое.

Как видно, предложенный механизм возникновения оптической анизотропии и расчет, выполненный на его основе с учетом эффектов локального поля, позволили объяснить форму экспериментальных спектров АО окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs. При этом, для обоих кристаллов рассчитанные и экспериментальные спектры отличаются друг от друга на некоторый сигнал, постоянный во всей исследуемой области спектра, причем этот сигнал имеет разный знак для поверхностей InAs и GaAs (см. рис.3). На основании этого можно сделать вывод, что кроме вклада эффектов локального поля в спектры окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs, существует еще одна причина анизотропии, приводящая к появлению спектрально независимых вкладов в наблюдаемые спектры АО. Мы предположили, что такой причиной может быть механическое напряжение в приповерхностной области исследуемых кристаллов.

В части 5.4 представлен краткий обзор исследования влияния механического давления на спектры АО.

В части 5.5 представлены результаты исследования влияния одноосного механического давления в направлениях  $\{110\}$  на спектры АО поверхностей (001) GaAs и InAs. На рис.5 показаны соответствующие спектры АО. В результате действия давления, в спектре АО появляется дополнительный, спектрально независимый вклад, отрицательный для давления в направлении  $[\bar{1}10]$  и положительный для давления в направлении  $[110]$ . В спектральных областях, связанных с поглощением в объеме, показанных стрелками на рис.5, при приложении давления происходит изменение формы и положения резонансных особенностей. Для выделения вклада, связанного только с действием давления, произведено вычитание спектра В из спектров А и С для GaAs (левая часть рисунка) и для InAs (правая часть рисунка), полученные спектры показаны в нижней части рис.5. Точечные линии показывают спектрально независимые вклады в спектры АО, обусловленные действием давления. Амплитуда такого вклада оказывается пропорциональной амплитуде давления. Коэффициенты пропорциональности для GaAs и InAs оказываются

равными  $2.1 \cdot 10^{-5}$  МПа<sup>-1</sup> и  $1.8 \cdot 10^{-5}$  МПа<sup>-1</sup> соответственно.

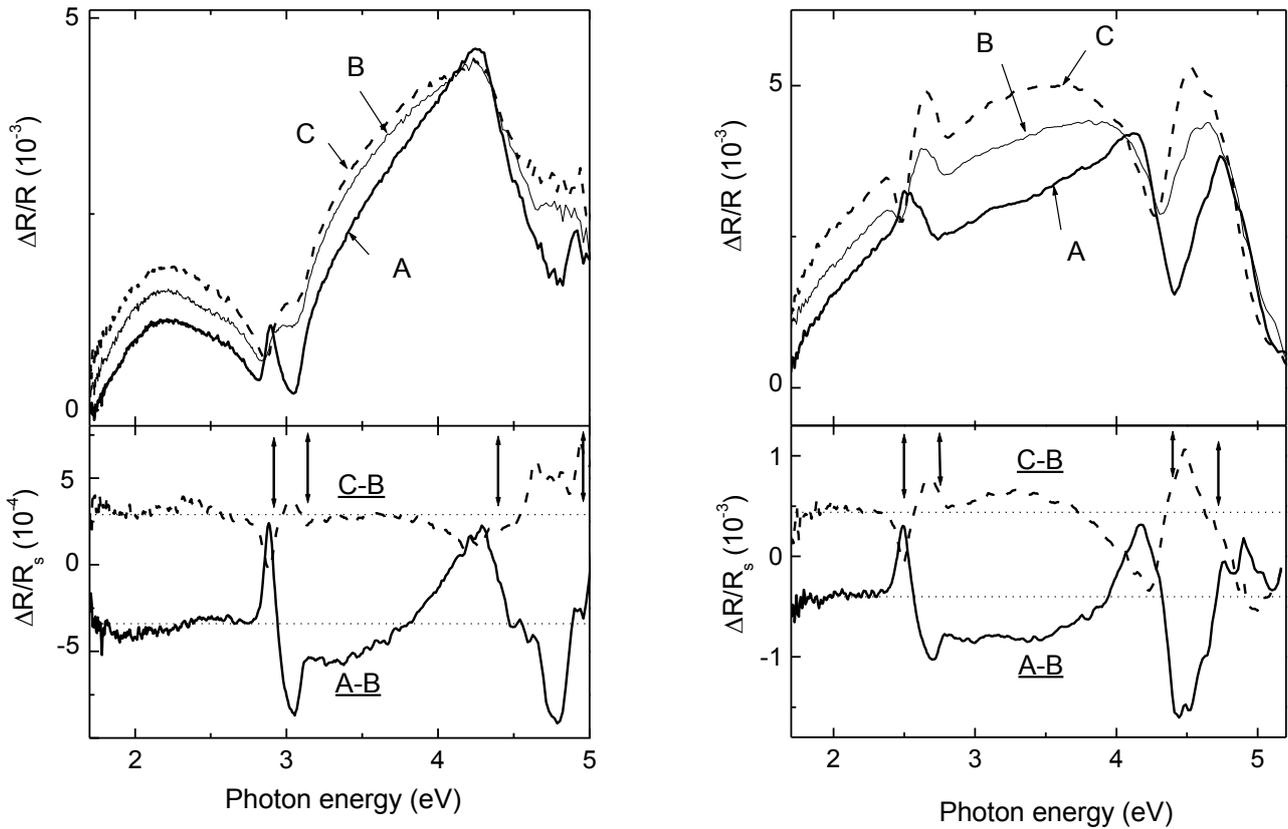


Рис. 5 Спектры АО поверхностей (001) GaAs (слева) и InAs(справа) при приложении одноосного давления: в направлении  $[\bar{1}10]$  – спектры А (GaAs-15.4 МПа, InAs-23 МПа) и в направлении  $[110]$  – спектры С (GaAs – 14 МПа, InAs – 23 МПа). Спектры В получены при приложении слабого давления фиксирующих пружин (GaAs – 0.7 МПа в  $[110]$ , InAs – 1 МПа в  $[\bar{1}10]$ ). Нижняя панель: спектры, полученные в результате вычитания спектра В из спектров А и С.

Теоретический расчет также показывает, что в результате приложения одноосного давления в направлениях  $[\bar{1}10]$  и  $[110]$ , на поверхности (001) наводится оптическая анизотропия, которая объясняется наличием пьезооптического эффекта в полупроводниках  $A^3B^5$ . Эта анизотропия прямо пропорциональна величине давления, а знак ее определяется направлением давления:

$$\Delta\epsilon = \epsilon_{xx} - \epsilon_{yy} = P_{44}/2(-X_{[-110]} + X_{[110]}), \tag{3}$$

$P_{44}$ - коэффициент пьезооптического тензора, спектральная зависимость которого для GaAs представлена в работе [5]. В работе производится сравнение экспериментально измеренных вкладов в спектр АО GaAs обусловленных действием приложенного давления и рассчитанных с использованием выражений (2) и (3). Совпадение результатов расчета и данных эксперимента наблюдалось при использовании в расчете значений давления 8.5 МПа и 11 МПа для направлений  $[110]$  и  $[\bar{1}10]$  соответственно.

В части 5.6 представлены результаты расчета спектров АО естественно окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs с учетом обоих вкладов: эффектов локального поля на интерфейсе

кристалл/окисел и наличия одноосного напряжения в кристалле вблизи интерфейса. Совпадение рассчитанных спектров и экспериментальных удается достичь при учете напряжения, эквивалентного давлению в направлении  $[\bar{1}10]$  амплитудой 126 МПа для GaAs и давлению в направлении  $[110]$  амплитудой 44 МПа для InAs. Отсутствие острых резонансных особенностей в экспериментальных спектрах АО, проявляющихся в рассчитанных спектрах при энергиях оптических переходов в объеме, объясняется сильной неоднородностью напряжения возникающего вследствие несоответствия длин связей в слоях интерфейса.

В случае GaAs, такое напряжение, очевидно, возникает при образовании двойного ковалентно связанного слоя атомов мышьяка на интерфейсе. На таком интерфейсе (по сравнению с объемом GaAs) происходит замещение слоя атомов галлия на слой атомов мышьяка, ковалентный радиус которых отличается от радиуса галлия на 6%. Это приводит к появлению сжатия приповерхностной области в направлении  $[\bar{1}10]$ . Оно оказывается максимальным на интерфейсе, где амплитуда эквивалентного ему давления не превышает 1 ГПа, и быстро спадает вглубь кристалла. Это значение согласуется со средней величиной давления 126 МПа, допущенного при расчете выше.

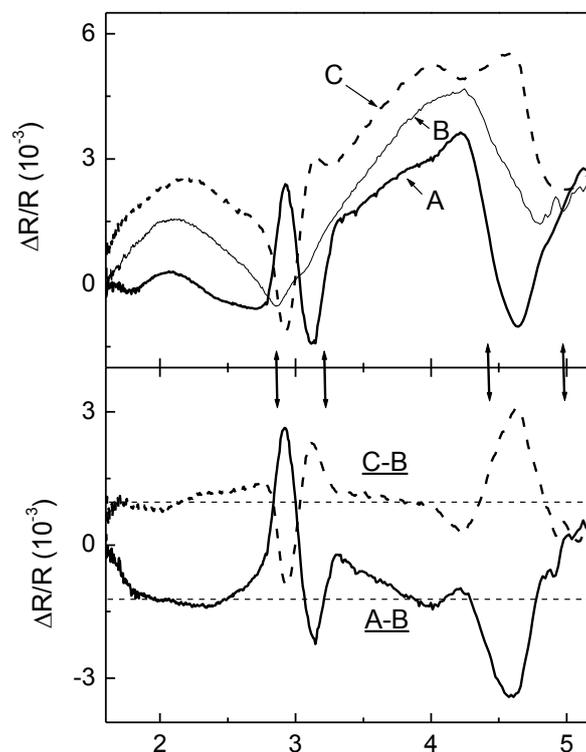


Рис. 6 Спектры АО естественно-окисленных поверхностей (001) GaAs  $n \cdot 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  (спектр А),  $p \cdot 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  (спектр В) и слаболегированного  $n \cdot 10^{16}$  (спектр С). На нижней панели представлены спектры, полученные вычитанием спектра В из спектров А и С.

Часть 5.7 посвящена исследованию влияния легирования образцов GaAs на спектр АО естественно-окисленной поверхности GaAs(001). На рис. 6 показаны спектры образцов с

легированием  $n\text{-}2\cdot 10^{18}\text{ см}^{-3}$  (спектр А),  $n\text{-}2\cdot 10^{16}\text{ см}^{-3}$  (спектр В) и  $p\text{-}2\cdot 10^{18}\text{ см}^{-3}$  (спектр С).

Как известно, вблизи поверхности (001) сильнолегированного GaAs существует электрическое поле области пространственного заряда, возникающей из-за пиннинга уровня Ферми на интерфейсе GaAs/окисел. Это поле направлено к поверхности для образца n-типа легирования и от поверхности для образца p-типа. Из-за обратного пьезоэлектрического эффекта в GaAs это электрическое поле создает механическое напряжение в плоскости (001). Так, в образце с легированием  $n\text{-}2\cdot 10^{18}\text{ см}^{-3}$  приповерхностная область оказывается сжатой по направлению  $[\bar{1}10]$  и одновременно растянутой в направлении  $[110]$  с амплитудой  $10^{-3}$  для обоих направлений. Для образца p-типа легирования направления сжатия и растяжения меняются на взаимно-ортогональные. Возникающее напряжение является причиной регистрируемой оптической анизотропии, спектральная зависимость которой, как и в случае приложения внешнего одноосного давления определяется спектральной зависимостью коэффициента  $P_{44}$ . Это объясняет то, что вклады в спектр АО, обусловленные влиянием легирования образца, показанные на нижней панели рис.6, по форме оказываются схожи с вкладами, обусловленными влиянием одноосного механического давления. Можно оценить величину спектрально независимого сигнала, создаваемого электрическим полем и определить значение эквивалентного ему механического одноосного давления. Это давление окажется максимальным на интерфейсе, где его амплитуда равна 59.4 МПа. Важно отметить, что, поскольку амплитуда электрического поля линейно спадает вглубь кристалла, величина спектрально-независимого сигнала оказывается пропорциональной амплитуде электрического поля усредненного по глубине проникновения света, которое для образцов с легированием  $2\cdot 10^{18}\text{ см}^{-3}$  оказывается в 1.6 раз меньше максимального, а амплитуда эквивалентного давления равной 36 МПа. Это исследование, в частности, показывает возможность использования данной методики для диагностики механического напряжения или электрического поля, амплитуда которых неоднородна по направлению распространения света вглубь кристалла.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Определена природа спектральных особенностей, присутствующих в спектре АО поверхности GaAs(001)(2x4), обогащенной мышьяком, в диапазоне 1.5-5.5 эВ. С этой целью были исследованы модификации спектров АО этой поверхности, вызванные адсорбции кислорода. Было установлено, что спектральная особенность вблизи 2.4 эВ, полностью обусловлена электронными оптическими переходами на поверхности, а особенность вблизи 3 эВ является суммой двух вкладов, только один из которых вблизи 2.85 эВ связан с переходами на поверхности. Особенность, проявляющаяся вблизи 4.5 эВ, обусловлена только оптической анизотропией приповерхностной области объема.

2. Проведено исследование электрон-фононного взаимодействия для оптических переходов на поверхности GaAs(001), обогащенной галлием со структурой (4x2). С этой целью экспериментально изучалась модификация спектра АО этой поверхности при изменении температуры в диапазоне 90К-680К. Было обнаружено, что доминирующая в спектре АО особенность вблизи 2.5 эВ, с повышением температуры уширяется и сдвигается в меньшие энергии. Эти эффекты объясняются влиянием электрон-фононного взаимодействия. Анализ полученных экспериментальных данных позволил оценить среднее значение энергии поверхностного фонона, которое составило  $10 \pm 2$  мэВ. Проведен расчет особенности в спектре АО поверхности GaAs(001)(4x2) в области 2-2.7 эВ при разных значениях температур. Этот расчет позволил оценить силу электрон-фононного взаимодействия и показать, что это взаимодействие для данного электронного перехода является сильным.
3. Установлена причина оптической анизотропии естественно окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs в диапазоне 1.5-5.5 эВ. Предложены атомарные модели интерфейсов кристалл/окисел с кристаллическим слоем атомов мышьяка обладающих анизотропной конфигурацией валентных связей, на основании которых выполнен расчет спектров АО естественно-окисленных поверхностей (001) GaAs и InAs. Установлено, что форма спектров АО обусловлена эффектами локального поля в анизотропном слое атомов мышьяка. Обнаружено, что в спектрах АО окисленных поверхностей присутствует также спектрально независимый вклад, объясняемый наличием механического напряжения в приповерхностной области кристалла.
4. Измерено влияние одноосного давления в направлении принципиальных осей {110} на спектры АО поверхности (001) GaAs. Обнаружено, что такое давление вызывает появление спектрально независимого сигнала, амплитуда которого прямо пропорциональна давлению. Установлены коэффициенты пропорциональности: в случае GaAs этот коэффициент равен  $2.1 \cdot 10^{-5}$  МПа<sup>-1</sup>, в случае InAs –  $1.8 \cdot 10^{-5}$  МПа<sup>-1</sup>. Знак сигнала анизотропного отражения положительный для давления в направлении [110] и отрицательный для давления в направлении  $[\bar{1}10]$ .
5. В спектрах анизотропного отражения окисленных поверхностей (001) сильнолегированных образцов GaAs обнаружен спектрально независимый сигнал, знак которого определялся типом легирования: отрицательный (положительный) для GaAs n-(p-) типа легирования. Этот сигнал возникает вследствие обратного пьезоэлектрического эффекта и обусловлен наличием электрического поля в слое объемного заряда у окисленной поверхности GaAs(001).

**Основные результаты диссертационной работы изложены в следующих публикациях:**

- [1] V.L. Berkovits, P. Chiaradia, D. Paget, A.B. Gordeeva, C.Goletti "Origin of the optical anisotropy of GaAs (001)"// Surf. Sci. **441** (1999) 26.

- V.L. Berkovits, P. Chiaradia, D. Paget, A.B. Gordeeva, C.Goletti "Origin of the optical anisotropy of GaAs (001)"//Surf. Sci. **474** (2001) 139.
- [2] В.Л. Берковиц, А.Б. Гордеева, В.М. Лантратов, Т.В. Львова "Оптическая анизотропия поверхностей (100) тройных соединений  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ "// ФТТ **42** (2000) 950.
- [3] В.Л. Берковиц, А.Б. Гордеева, В.А. Кособукин, "Эффекты локального поля в спектрах анизотропного оптического отражения поверхности (001) арсенида галлия"// ФТТ **43** (2001), 985.
- [4] V.L. Berkovits, A.B. Gordeeva, V.A. Kosobukin, "Local-field effects in reflectance anisotropy spectra of oxidized (001) GaAs and AlGaAs surfaces"// Solid State Commun., **119** (2001) 657.
- [5] D.Paget, O.E. Tereshchenko, A.B. Gordeeva, V.L. Berkovits, G.Onida " Origin of the broadening of surface optical transition of As-rich and Ga-rich GaAs(001)"//Surf. Sci. **529** (2003) 204.
- [6] V.L. Berkovits, A.B. Gordeeva, and V.A. Kosobukin "Effects of the local field and inherent deformation in reflectance anisotropy spectra of  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  semiconductor surfaces"//Phys. Status Solidi **B 247** (2010) 1932.
- [7] В.Л. Берковиц, А.Б. Гордеева, Т.В. Львова, В.П. Улин "Электронная оже-спектроскопия и спектроскопия анизотропного отражения монослойных нитридных пленок на поверхностях (001) кристаллов GaAs и GaSb"//ФТП **46** (2012) 1463.
- [8] В.Л. Берковиц, А.Б. Гордеева, П. Киарадиа, Д. Паже "Спектры оптических переходов чистых поверхностей (100)GaAs"//Труды международной конференции «Оптика Полупроводников», Ульяновск, 2000г., стр. 36.
- [9] А.Б. Гордеева, В.А. Кособукин, В.Л. Берковиц "Оптическая анизотропия поверхностей (100) $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ "//Труды международной конференции «Оптика Полупроводников», Ульяновск, 2000г., стр.28.
- [10] А.Б. Гордеева, В.Л. Берковиц, В.Л. Кособукин "Исследование поверхностей полупроводников  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  и интерфейсов на их основе методом спектроскопии анизотропного отражения света"//в Материалах 12 Всероссийской научной конференции студентов – физиков и молодых ученых, Новосибирск, 2006г., 441.
- [11] A.B. Gordeeva, V.L. Berkovits, V.A. Kosobukin "Effects of the local-field and inherent deformation in reflectance anisotropy spectra of  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  semiconductor surfaces"//in Book of abstracts of OSI VIII Ischia, Italy, 2009г. p.110.

#### Список цитируемой литературы:

- [1] W.G. Schmidt, F. Bechstedt, J. Bernholc "GaAs(0 0 1) surface reconstructions: geometries, chemical bonding and optical properties"//Appl. Surf. Sci. **190** (2002) 264.
- [2] А.С. Давыдов. "Теория молекулярных экситонов"//Наука, Москва 1968г. 296 стр.
- [3] I.Gerard, C. Debiemme-Chouvy, J. Vigneron, F. Bellenger, S. Kostelitz, A. Etcheberry "Local oxide growth on the n-GaAs surface studied by small area XPS"//Surf. Sci. **433-435** (1999) 131.
- [4] В.Л. Берковиц, А.Б. Гордеева, В.А. Кособукин "Эффекты локального поля в спектрах анизотропного оптического отражения поверхности (001) арсенида галлия"// ФТТ **43** (2001) 985.
- [5] P.Etchegoin, J.Kircher, M.Cardona, C. Grein, and E. Bustarret "Piezo-optics of GaAs"// Phys.Rev. **B46** (1992) 15139.