

# Таммовские интерфейсные состояния в периодических гетероструктурах ZnSe/BeTe

© А.С. Гуревич, В.П. Кочерешко, А.В. Платонов, Б.А. Зякин, А. Вааг\*, Г. Ландвер\*\*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: alexei.gurevich@mail.ioffe.ru

\* Braunschweig Technical University,  
38106 Braunschweig, Germany

\*\* Physikalisches Institut der Universität Würzburg,  
97074 Würzburg, Germany

(Поступила в Редакцию 16 декабря 2004 г.)

Методом эллипсометрии исследовались спектральные зависимости латеральной оптической анизотропии периодических нелегированных гетероструктур типа II ZnSe/BeTe с неэквивалентными интерфейсами. В спектрах обнаружено два вида особенностей, отвечающих оптическим переходам с энергиями, лежащими в запрещенной зоне. Положение особенностей первого типа не зависит от периода гетероструктур. Особенности второго типа смещаются в область низких энергий при уменьшении периода гетероструктур. Наблюдаемое поведение объясняется в рамках модели, учитывающей существование электронных и дырочных интерфейсных состояний, а также интерфейсного состояния смешанного типа.

Работа поддержана грантом № 04-02-16674-а Российского фонда фундаментальных исследований. Работа А.С.Г. и А.В.П. частично поддержана грантом НШ № 2199.2003.2 программы поддержки ведущих научных школ.

## 1. Введение

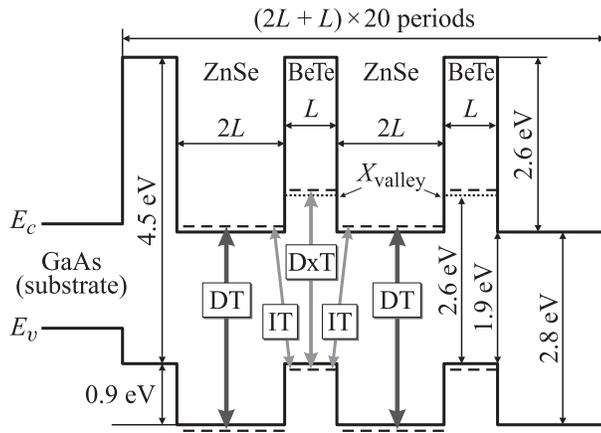
В 1932 г. Тамм предсказал существование состояний носителей, локализованных на поверхности полупроводникового кристалла [1]. Такие состояния характеризуются одномерной локализацией вдоль направления нормали к поверхности и энергией, попадающей в запрещенную зону объемного полупроводника. Спустя 17 лет в работе [2] было впервые высказано предположение о возможности существования аналогичных состояний вблизи резкого интерфейса, разделяющего два различных полупроводниковых материала. Интерфейс между двумя различными полупроводниками по аналогии с поверхностью представляет собой сильное возмущение периодического потенциала кристалла.

В [3] в рамках метода сильной связи без учета спин-орбитального взаимодействия была теоретически показана возможность существования электронных состояний, локализованных на гетероинтерфейсе, с энергией внутри запрещенной зоны. В работе [4] — также в рамках метода сильной связи, но с учетом спин-орбитального взаимодействия — теоретически исследованы дырочные интерфейсные состояния, локализованные на гетерогранице типа II InAs/AlSb. В свою очередь для объяснения температурной зависимости концентрации носителей и аномально высокой подвижности электронов в квантовых ямах (КЯ) InAs/AlSb, авторы работы [5] постулировали существование на формирующих КЯ гетероинтерфейсах локализованных состояний носителей с высокой латеральной подвижностью.

Гетерограницы могут оказывать существенное влияние не только на транспортные но и на оптические

свойства полупроводниковых структур. К настоящему времени установлено, что пониженная точечная симметрия интерфейса между двумя полупроводниками со структурой цинковой обманки приводит к латеральной анизотропии оптических свойств полупроводниковых гетероструктур [6]. В случае периодических структур ZnSe/BeTe с неэквивалентными интерфейсами это проявляется в различии эффективных показателей преломления гетероструктуры как целого, отвечающих кристаллографическим направлениям  $[110]$  и  $[1\bar{1}0]$ . При этом наибольшее различие как мнимой, так и действительной частей показателей преломления наблюдалось в спектральной области, соответствующей пространственно прямым экситонным переходам в таких структурах [7].

В настоящей работе методом эллипсометрии в широком спектральном диапазоне исследована зависимость латеральной оптической анизотропии от периода гетероструктур ZnSe/BeTe с неэквивалентными интерфейсами. В спектральных зависимостях оптической анизотропии обнаружено два типа особенностей, отвечающих оптическим переходам с энергиями внутри запрещенной зоны. Проведенные измерения показали, что при уменьшении периода гетероструктур с 345 до 45 Å особенности первого типа практически не меняют своего положения. В то же время особенности второго типа при уменьшении периода гетероструктур испытывают монотонный сдвиг в область низких энергий, достигающий 110 meV. Наблюдаемое поведение указывает на наличие в исследованных структурах состояний носителей, локализованных на гетероинтерфейсах ZnSe/BeTe.



**Рис. 1.** Зонная диаграмма периодических гетероструктур ZnSe/BeTe с разрывом зон типа II. Все исследованные структуры содержали 20 периодов ZnSe/BeTe. Исследовались гетероструктуры с толщинами слоев BeTe  $L$ , равными: 115, 50, 20 и 15 Å. На схеме: DT — пространственно прямые оптические переходы в слоях ZnSe; DxT — пространственно прямые оптические переходы с участием состояний валентной зоны и  $X$ -долины BeTe; IT — пространственно непрямые оптические переходы между электронами в слоях ZnSe и дырками в слоях BeTe, обусловленные перекрытием волновых функций носителей, проникающих под барьеры.

## 2. Эксперимент

Исследовались периодические гетероструктуры ZnSe/BeTe с разрывом зон типа II, выращенные методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках GaAs в направлении [001]. Зонная диаграмма гетероструктур представлена на рис. 1. Исследовались гетероструктуры, содержащие 20 периодов. Толщины слоев ZnSe/BeTe были равны 230 Å/115 Å, 100 Å/50 Å, 40 Å/20 Å и 30 Å/15 Å. Благодаря выбранному соотношению толщин слоев ZnSe и BeTe, (два к одному), а также малому различию в постоянных решетки соединений ZnSe, BeTe и GaAs (не превышает 0.4%) данные гетероструктуры практически не содержат напряжений. Специального легирования исследованных образцов не проводилось.

Для ZnSe величина запрещенной зоны в точке  $\Gamma$  составляет  $E_g^\Gamma(\text{ZnSe}) = 2.8 \text{ eV}$  [8]; величина запрещенной зоны ZnSe, ассоциированной с  $X$ -долиной, составляет  $E_g^X(\text{ZnSe}) = 4.6 \text{ eV}$  [9]. Для BeTe аналогичные величины равны  $E_g^\Gamma(\text{BeTe}) = 4.5 \text{ eV}$  [10] и  $E_g^X(\text{BeTe}) = 2.6 \text{ eV}$  [11]; данный полупроводник является непрямозонным.

В исследованных гетероструктурах реализуется три типа межзонных оптических переходов (рис. 1): пространственно прямые переходы в слоях ZnSe (DT), пространственно прямые переходы между состояниями в валентной зоне и состояниями в  $X$ -долине BeTe (DxT), а также пространственно непрямые переходы (IT) между электронами в слоях ZnSe и дырками в слоях BeTe, обусловленные перекрытием волновых функций носителей, проникающих под барьеры.

В отличие от объемного полупроводника со структурой цинковой обманки, обладающего точечной симметрией  $T_d$ , идеальный интерфейс, а следовательно и одиночный гетеропереход обладает точечной симметрией  $C_{2v}$ . В случае гетероструктуры с КЯ ZnSe, окруженной барьерами вида Zn–Te слева (справа) от КЯ и Be–Se справа (слева) от КЯ, пониженная симметрия  $C_{2v}$ , сохраняется у КЯ и, следовательно, у всей гетероструктуры как целого [12]. Как показали прямые эллипсометрические измерения оптических констант, это приводит к естественной анизотропии эффективной диэлектрической проницаемости гетероструктур ZnSe/BeTe в синезеленой области спектра [7]. Вызванный низкой симметрией интерфейсов эффект оптической анизотропии был использован в настоящей работе для исследования состояний носителей, локализованных на гетерограницах между ZnSe и BeTe.

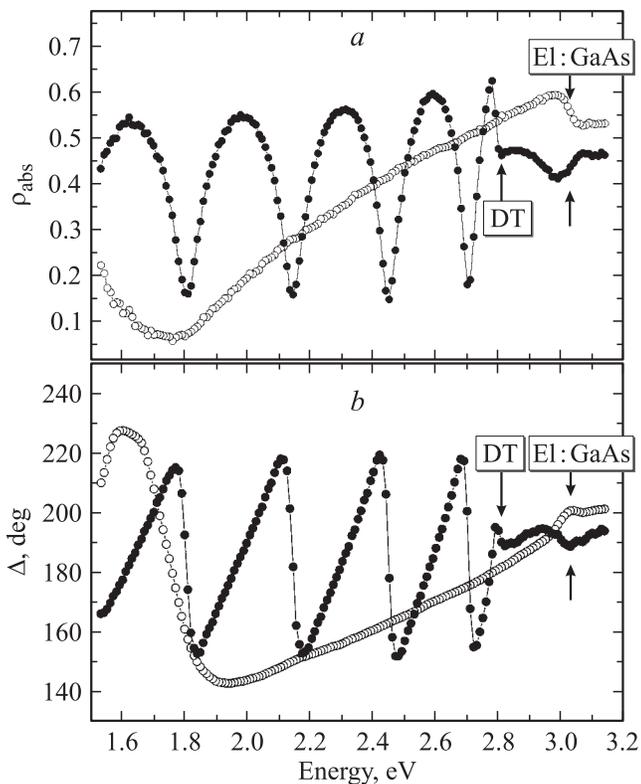
Для измерения спектральных зависимостей латеральной оптической анизотропии гетероструктур ZnSe/BeTe с неэквивалентными интерфейсами использовался эллипсометр с вращающимся компенсатором [13]. Измерения проводились при температуре образца 77 К. При фиксированных угле падения света на образец и ориентации кристаллографических осей [110] и  $[1\bar{1}0]$  образца относительно плоскости падения (образованной падающим на образец и отраженным от него лучами) измерялась спектральная зависимость отношения комплексных амплитудных коэффициентов отражения Френеля [14]

$$\rho(E) = \frac{r_p}{r_s} \equiv \rho_{abs}(E) \exp[i\Delta(E)]. \quad (1)$$

Затем образец поворачивался на  $90^\circ$  относительно оси роста гетероструктуры, и спектральная зависимость отношения коэффициентов Френеля измерялась вновь при всех прочих равных условиях. В выражении (1)  $r_p$  и  $r_s$  — комплексные амплитудные коэффициенты отражения Френеля для  $p$ - и  $s$ -поляризованных волн соответственно;  $\rho_{abs}$  — модуль отношения коэффициентов Френеля, показывающий насколько слабее отражается  $p$ -волна по отношению к  $s$ -волне;  $\Delta$  — аргумент отношения коэффициентов Френеля, представляющий собой сдвиг фаз между  $p$ - и  $s$ -волнами, возникающий в результате отражения;  $E$  — энергия фотонов. Поскольку период исследованных гетероструктур ZnSe/BeTe много меньше длины волны света в исследуемом спектральном диапазоне, такие структуры можно рассматривать как однородную оптически анизотропную пленку и описывать ее взаимодействием со светом тензором диэлектрической проницаемости [15].

На рис. 2 представлены измеренные при угле падения света  $\theta_0 = 53.40^\circ$  спектральные зависимости величин  $\rho_{abs}$  и  $\Delta$ . В процессе измерения представленных зависимостей кристаллографические оси  $[1\bar{1}0]$  образцов были перпендикулярны плоскости падения света. Темными кружками представлены результаты измерений

для гетероструктуры ZnSe/BeTe с периодом  $345 \text{ \AA}$  (полная толщина гетероструктуры равна  $6900 \text{ \AA}$ ), светлые кружки — результаты для гетероструктуры с периодом  $45 \text{ \AA}$  (полная толщина равна  $900 \text{ \AA}$ ). На представленных зависимостях наблюдается периодическое изменение величин  $\rho_{abs}$  и  $\Delta$  с ростом энергии фотонов, что отвечает интерференции световых волн, отраженных от границ гетероструктура–внешняя среда и гетероструктура–подложка. При энергиях квантов света, соответствующих пространственно прямым оптическим переходам в слоях ZnSe, картина отражения от исследуемых образцов меняется. В случае наиболее толстой гетероструктуры с толщинами слоев  $230 \text{ \AA}/115 \text{ \AA}$  наблюдается резкое изменение величин  $\rho_{abs}$  и  $\Delta$ , обусловленное сильным поглощением отраженной от границы гетероструктура–подложка световой волны (DT). Для структуры с толщиной слоев  $30 \text{ \AA}/15 \text{ \AA}$  отвечающие пространственно прямым переходам особенности не видны на фоне особенностей, связанных с резким изменением коэффициента преломления подложки (E1:GaAs). Данная особенность обусловлена межзонными оптическими переходами с участием состояний в *L*-долине GaAs [16].



**Рис. 2.** Спектральные зависимости величин  $\rho_{abs}$  и  $\Delta$ , измеренные для гетероструктур ZnSe/BeTe с периодами  $345 \text{ \AA}$  (темные кружки) и  $45 \text{ \AA}$  (светлые кружки). Символом DT обозначены особенности, связанные с пространственно прямыми оптическими переходами в слоях ZnSe; E1:GaAs — проявление особенности в коэффициенте преломления подложки GaAs. Измерения проводились при угле падения света на образец  $\theta_0 = 52.95^\circ$  и температуре образца  $77 \text{ K}$ .

В случае отражения света от системы анизотропный слой–изотропная подложка измеряемые величины  $\rho_{abs}$  и  $\Delta$  определяются, в частности, ориентацией осей тензора диэлектрической функции слоя относительно плоскости падения. Поэтому ненулевая величина

$$\delta\Delta = \Delta_{[1\bar{1}0]} - \Delta_{[110]} \quad (2)$$

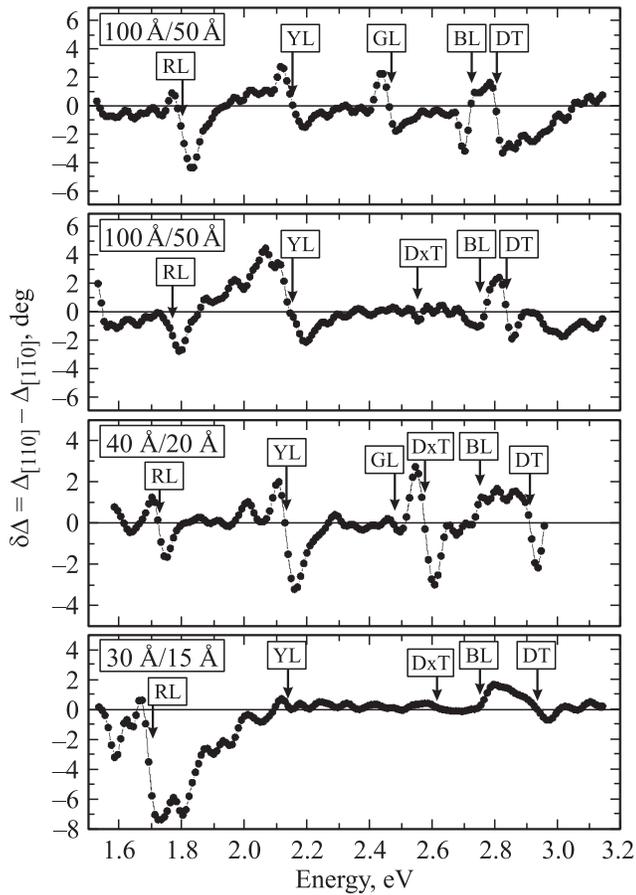
отвечает анизотропии оптических констант в плоскости исследуемых гетероструктур. В выражении (2)  $\Delta_{[1\bar{1}0]}$  — обусловленная отражением разность фаз между *p*- и *s*-поляризованными волнами, измеренная в ситуации, когда кристаллографическая ось  $[1\bar{1}0]$  исследуемого образца была перпендикулярна плоскости падения;  $\Delta_{[110]}$  — та же величина, но измеренная в ситуации, когда кристаллографическая ось  $[\bar{1}10]$  была параллельна плоскости падения (т.е. после поворота образца на  $90^\circ$  относительно оси роста).

### 3. Результаты эксперимента

На рис. 3 представлены спектральные зависимости величины  $\delta\Delta$ , отвечающие латеральной оптической анизотропии, для четырех периодических гетероструктур с толщиной слоев  $230 \text{ \AA}/115 \text{ \AA}$ ,  $100 \text{ \AA}/50 \text{ \AA}$ ,  $40 \text{ \AA}/20 \text{ \AA}$  и  $30 \text{ \AA}/15 \text{ \AA}$  соответственно.

На представленных спектральных зависимостях наблюдаются две группы линий, смещающихся в область больших энергий при уменьшении периода гетероструктур. В диапазоне энергий  $E = 2.80\text{--}2.93 \text{ eV}$  для всех образцов наблюдаются особенности DT, связанные с пространственно прямыми экситонными переходами в слоях ZnSe. Такие переходы характеризуются: во-первых, смещением в область больших энергий с уменьшением толщины слоев ZnSe, что отвечает увеличению энергии размерного квантования носителей; во-вторых, четкой сменой знака сигнала, обусловленной различием знака латеральной оптической анизотропии для оптических переходов с участием легкой и тяжелой дырок [7]. Другая группа линий — DxT, испытывающая монотонный коротковолновый сдвиг с уменьшением периода гетероструктур — связана с пространственно прямыми переходами в слоях BeTe. Данный полупроводник является непрямозонным, и наблюдаемые особенности обусловлены переходами между состояниями в валентной зоне и состояниями в *X*-долине BeTe [10].

Помимо этого, на представленных зависимостях наблюдаются три группы особенностей, практически не меняющих своего спектрального положения в сравнении с пространственно прямыми переходами в слоях ZnSe и BeTe. Введем обозначения данных особенностей в соответствии с цветовым восприятием света в той спектральной области, в которую они попадают. Для всех образцов при энергии  $E \approx 2.75 \text{ eV}$  наблюдается особенность BL (Blue Line), которая характеризуется возрастанием ширины при уменьшении периода гетеро-



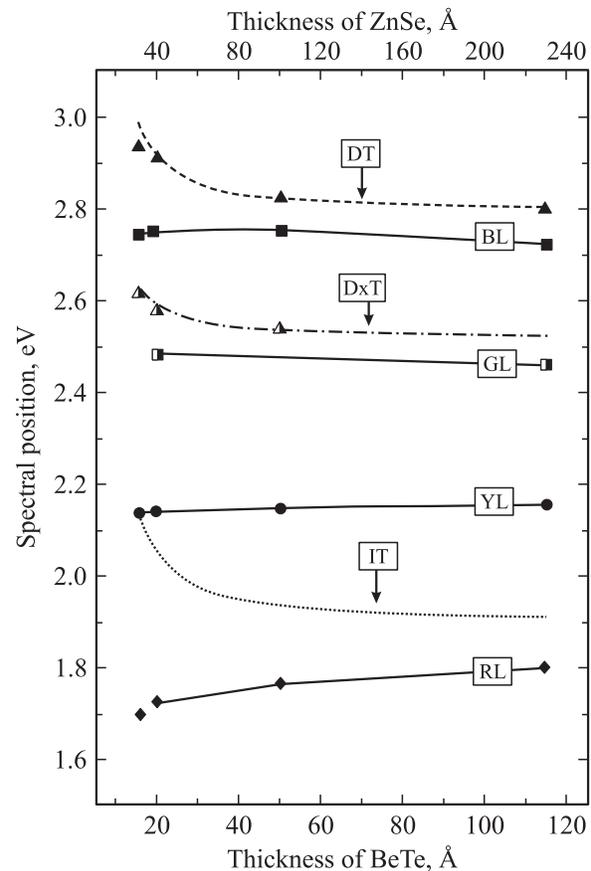
**Рис. 3.** Спектральные зависимости латеральной оптической анизотропии, измеренные для четырех периодических гетероструктур с толщиной слоев ZnSe/BeTe 230 Å/115 Å, 100 Å/50 Å, 40 Å/20 Å и 30 Å/15 Å соответственно. Символами DT и DxT обозначены характерные для исследуемых гетероструктур особенности, отвечающие пространственно прямым межзонным переходам в слоях ZnSe и в слоях BeTe соответственно. Символами RL, YL, GL и BL обозначены не наблюдавшиеся ранее особенности, лежащие в запрещенной зоне. Угол падения  $\theta_0 = 52.95^\circ$ . Температура образцов 77 К.

структур. Для образцов с толщинами слоев ZnSe/BeTe 230 Å/115 Å и 40 Å/20 Å при энергии  $E \approx 2.47$  eV наблюдались особенности GL (Green Line), амплитуда которых, так же как и для переходов DxT, проявляет зависимость от угла падения света. При энергии  $E \approx 2.15$  eV для всех образцов наблюдается еще одна группа линий — YL (Yellow Line) также без заметного изменения спектрального положения при уменьшении периода гетероструктур с 345 до 45 Å.

Наконец при энергиях, меньших 1.80 eV, для всех образцов в спектрах наблюдается линия, испытывающая монотонный сдвиг в область меньших энергий — RL (Red Line). Данный сдвиг в исследованном диапазоне периодов гетероструктур ZnSe/BeTe достигает 110 meV и сравним по величине с увеличением энергии межзонных переходов вследствие размерного квантования.

#### 4. Интерпретация экспериментальных результатов

На рис. 4 приведены зависимости спектрального положения наблюдавшихся особенностей от толщины слоев ZnSe и BeTe (периода) исследованных гетероструктур. Темными и полузаполненными треугольниками представлены особенности, отвечающие пространственно прямым переходам в слоях ZnSe и BeTe соответственно (DT и DxT). Штриховой и штрихпунктирной кривыми представлены рассчитанные в рамках метода эффективной массы зависимости энергии пространственно прямых оптических переходов в слоях ZnSe и BeTe. Пунктирная кривая — рассчитанная зависимость энергии пространственно непрямым межзонных оптических переходов (IT, рис. 1). Вследствие малой области пере-



**Рис. 4.** Зависимость спектрального положения особенностей в спектрах оптической анизотропии от периода гетероструктур ZnSe/BeTe. Темными и полузаполненными треугольниками представлены характерные особенности, отвечающие пространственно прямым оптическим переходам в слоях ZnSe и BeTe соответственно. Штриховой и штрихпунктирной кривыми представлены зависимости энергий этих переходов, рассчитанные методом эффективной массы (соответственно DT и DxT). Пунктирная кривая — расчет энергий для пространственно непрямым переходов (IT). RL, YL, GL и BL — не наблюдавшиеся ранее особенности, попадающие в область запрещенной зоны.

крытия ( $\sim 5 \text{ \AA}$ ) волновых функций электронов и дырок, проникающих под барьеры, и, следовательно, малой силы осциллятора такие переходы слабо проявляются при температурах жидкого азота в спектральных зависимостях величины  $\delta\Delta$  (см. выражение (2)).

При расчете зависимостей энергии межзонных оптических переходов от толщины слоев в гетероструктурах использовались следующие оценки значений эффективных масс носителей. Для ZnSe величины эффективных масс электрона и тяжелой дырки в  $\Gamma$  точках составляли в единицах свободной массы электрона  $m_e^*(\text{ZnSe}) = 0.16$  и  $m_{hh}^*(\text{ZnSe}) = 0.70$  соответственно [8]. Для электрона в  $X$ -долине BeTe использовалась оценка  $m_x^*(\text{BeTe}) = 6.0$  [10]. Остальные значения подбирались, исходя из эмпирического правила о пропорциональности величины эффективной массы носителей ширине запрещенной зоны материала:  $m_e^*(\text{BeTe}) = 0.25$ ,  $m_{hh}^*(\text{BeTe}) = 1.15$  и  $m_x^*(\text{ZnSe}) = 3.80$ . Расчет основного уровня энергии тяжелой дырки, локализованной на барьере ZnSe, осуществлялся в соответствии с работой [17].

На рис. 4 темными квадратами, полузаполненными квадратами и темными кружками представлены особенности BL, GL и YL, практически не меняющие своего положения при уменьшении толщины слоев в гетероструктурах. Ромбами представлена зависимость спектрального положения особенности RL, испытывающей заметный низкоэнергетический сдвиг при уменьшении периода гетероструктур.

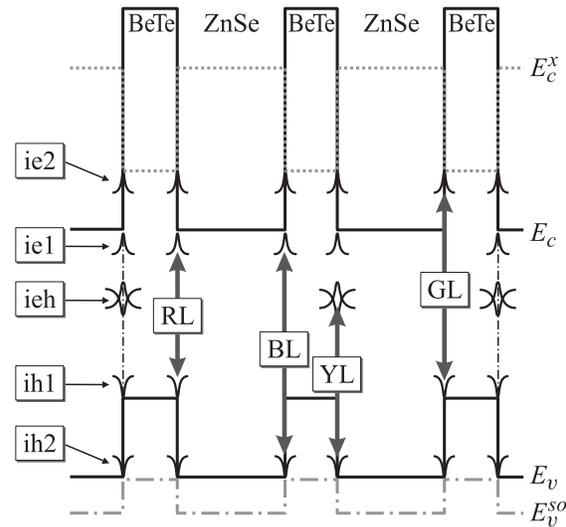
Наблюдаемые в спектральных зависимостях латеральной оптической анизотропии четыре типа спектральных особенностей — BL, GL, YL и RL — не могут быть обусловлены межзонными оптическими переходами, во-первых, вследствие своего спектрального положения, а во-вторых, из-за отсутствия сдвига в область больших энергий при уменьшении толщины слоев ZnSe и BeTe. Кроме того, особенности BL, GL, YL и RL проявляются в спектрах оптической анизотропии с амплитудой того же порядка, что и особенности, связанные с пространственно прямыми переходами. (При том что в спектральных зависимостях величин  $\rho_{abs}$  и  $\Delta$  данные особенности не видны на фоне пространственно прямых межзонных переходов, см. рис. 2).

Наконец, наблюдаемые особенности не могут быть приписаны структурным свойствам или дефектам какой-либо индивидуальной гетерограницы, поскольку эффект наблюдался на ряде гетероструктур, причем каждая структура содержит достаточно большое число интерфейсов — 20 гетерограниц. Такое поведение указывает на существование в исследуемых структурах таммовских интерфейсных состояний, т. е. состояний носителей, сильно локализованных на гетерограницах вследствие резкого скачка параметров периодического потенциала кристалла.

Исходя из энергетического положения обнаруженных особенностей, а также из полученных в рамках метода сильной связи теоретических результатов [3,4], указы-

вающих на энергетическое положение интерфейсных состояний, можно предположить следующую картину оптических переходов между интерфейсными состояниями в исследованных гетероструктурах (рис. 5). Для объяснения полученных результатов необходимо учесть электронные и дырочные интерфейсные состояния (ИС), связанные с разрывами на гетероинтерфейсах зоны проводимости и валентной зоны соответственно. Электронное ИС  $ie1$  обусловлено разрывом зоны проводимости в точке  $\Gamma$ . Электронное ИС  $ie2$  связано с разрывом уровня  $X$ -долины зоны проводимости (пунктирная ломанная на рис. 5). В свою очередь дырочное ИС  $ih1$  обусловлено скачком валентной зоны тяжелых и легких дырок, а дырочное ИС  $ih2$  обусловлено разрывом спин-орбитально отщепленной валентной зоны (штрихпунктирная ломанная). Величины разрывов соответствующих зон взяты из работ [9,10].

При таком подходе наблюдаемые в спектральных зависимостях оптической анизотропии гетероструктур особенности RL вызваны оптическими переходами между электронными ИС  $ie1$  и дырочными ИС  $ih1$  (рис. 5). Особенности GL обусловлены оптическими переходами между электронными ИС  $ie2$  и дырочными ИС  $ih1$ . Наконец, особенности BL обусловлены оптическими переходами между электронными ИС  $ie1$  и дырочными ИС  $ih2$ .



**Рис. 5.** Энергетическое положение интерфейсных состояний в гетероструктурах ZnSe/BeTe. Интерфейсные состояния электронного типа  $ie1$  и  $ie2$  обусловлены скачками уровней зоны проводимости в  $\Gamma$  точке ( $E_c$ , сплошная ломанная) и в  $X$ -долине ( $E_c^x$ , пунктирная ломанная) соответственно. Дырочные интерфейсные состояния  $ih1$  и  $ih2$  связаны с разрывами валентной зоны тяжелых и легких дырок ( $E_v$ , сплошная ломанная) и спин-орбитально отщепленной валентной зоны ( $E_v^{so}$ , штрихпунктирная ломанная) соответственно. Символом  $ieh$  обозначено интерфейсное состояние смешанного типа. Жирными вертикальными стрелками отмечены наблюдаемые оптические переходы между интерфейсными состояниями RL, YL, GL и BL.

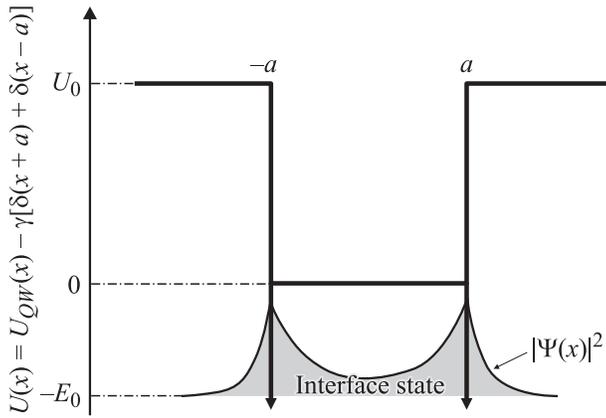


Рис. 6. Локализация носителя на двух интерфейсах.

Учет перечисленных четырех ИС не позволяет объяснить наблюдаемую особенность YL. Для объяснения данной особенности необходимо учесть ИС  $ic\hbar$ , которое в силу своего энергетического положения является, по видимому, ИС смешанного типа (рис. 5). О возможном существовании состояний такого типа упоминалось в работе [18], посвященной исследованию обобщенных граничных условий на гетероинтерфейсах в рамках многозонного метода плавной огибающей. При учете смешанного ИС  $ic\hbar$  наблюдаемая особенность YL обусловлена оптическими переходами между ИС  $ic\hbar$  и дырочным ИС  $ih2$ .

В рамках предложенной модели зависимость спектрального положения наблюдаемых особенностей от толщины слоев гетероструктур интерпретируется следующим образом. Из рассмотрения общих свойств уравнения Шредингера следует, что постановка граничного условия на волновую функцию частицы и ее производную по координате эквивалентна добавлению к гамильтониану потенциала нулевого размера в той же точке пространства [19]. Подобный подход применим и к электрону в полупроводниковом кристалле. Согласно работе [20], при переходе от многозонного метода эффективной массы к однозонному влияние граничных условий, связанных с резким гетероинтерфейсом, может быть учтено добавлением в гамильтониан точечного потенциала вида  $\gamma\delta(x-x_0)$ , где  $x_0$  — координата гетероинтерфейса,  $\gamma$  — мощность потенциала. Учитывая граничные условия описанным образом, рассмотрим локализованное на двух гетероинтерфейсах состояние, а именно состояние, локализованное в одномерном и симметричном относительно начала координат потенциале вида

$$U(x) = U_{QW}(x) - \gamma[\delta(x+a) + \delta(x-a)]. \quad (3)$$

Здесь  $a$  — половина расстояния между интерфейсами;  $\gamma$  — положительный параметр, определяющий мощность  $\delta$ -функции;  $U_{QW}(x)$  описывает потенциальную энергию одиночной КЯ с конечными барьерами высотой  $U_0$  и

шириной  $2a$  (рис. 6). Соответствующее одномерное уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U_{QW}(x)\psi - \gamma[\delta(x+a) + \delta(x-a)]\psi = E\psi. \quad (4)$$

При этом волновая функция основного состояния записывается следующим образом:

$$\psi(x) = \begin{cases} A \exp(\eta_0 x) & x < -a \\ A \frac{\exp(-\eta_0 a)}{\text{ch}(q_0 a)} \text{ch}(q_0 x) & -a < x < a \\ a \exp(-\eta_0 x) & x > a \end{cases}. \quad (5)$$

Здесь  $\eta_0$  — волновой вектор частицы в области пространства  $x < -a$  и  $a < x$ ;  $q_0$  — волновой вектор частицы в области пространства  $-a < x < a$ ;  $A$  — константа, определяемая из условия нормировки. В выражении (4) и далее  $m$  — эффективная масса частицы. На рис. 6 представлено распределение вероятности частицы с волновой функцией, определяемой выражением (5). Абсолютное значение энергии состояния  $E_0$ , а также связь величин  $\eta_0$  и  $q_0$  даются выражениями

$$E_0 = \frac{\hbar^2 q_0^2}{2m}, \quad \eta_0^2 - q_0^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}. \quad (6)$$

Условие на скачок первой производной волновой функции по координате в точках  $x = \pm a$  приводит к трансцендентному уравнению, определяющему волновой вектор и, следовательно, энергию основного состояния частицы,

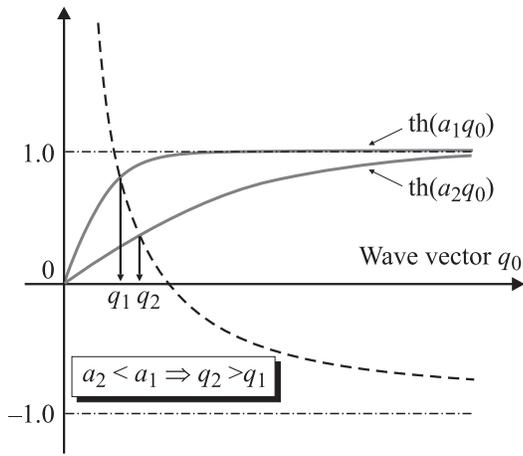
$$\text{th}(q_0 a) = \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \frac{1}{q_0} - \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2 q_0^2} + 1}. \quad (7)$$

Данное уравнение имеет решение только в том случае, когда выполняется условие

$$\gamma^2 > \frac{\hbar^2 U_0}{2m}. \quad (8)$$

Физический смысл данного условия можно сформулировать следующим образом: сила, действующая на частицу со стороны  $\delta$ -функции и притягивающая частицу к интерфейсу, превосходит силу, действующую на частицу со стороны потенциальной ступеньки, которая стремится оттолкнуть частицу от интерфейса. На рис. 7 представлены зависимости левой и правой частей уравнения (7) от волнового вектора  $q_0$  (при выполнении условия (8)). В случае когда расстояние между интерфейсами много больше характерного размера локализации частицы на одиночной  $\delta$ -функциональной КЯ,

$$a \gg L, \quad L \approx \frac{\hbar^2}{m\gamma}, \quad (9)$$



**Рис. 7.** К расчету волнового вектора состояния носителя, локализованного на двух интерфейсах. Сплошные кривые — левая часть уравнения (7) при различных расстояниях между интерфейсами. Штриховая кривая — правая часть уравнения (7). При уменьшении расстояния между интерфейсами волновой вектор и абсолютное значение энергии интерфейсного состояния растут, следовательно, энергия оптического перехода между электронным и дырочным интерфейсными состояниями падает.

левую часть уравнения (7) можно заменить единицей. В этом случае получаем энергию состояния (по модулю)

$$E_0 = \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2} - \frac{U_0}{2} \left( 1 - \frac{U_0\hbar^2}{4m\gamma^2} \right). \quad (10)$$

При этом уменьшение расстояния между интерфейсами не будет приводить к заметному изменению энергии ИС, и, следовательно, энергии оптических переходов между ними. Такая ситуация наблюдается для оптических переходов BL, GL и YL (рис. 5), которые не меняют заметным образом своего спектрального положения при уменьшении периода гетероструктур (рис. 4).

В случае когда расстояние между интерфейсами сравнимо с характерной длиной  $L$ , ситуация изменится. Как видно из рис. 7, при уменьшении  $a$  значение волнового вектора  $q_0$ , отвечающее решению уравнения (7), возрастает. Следовательно, определяемое выражением (6) абсолютное значение энергии локализованной частицы будет возрастать, а энергии оптических переходов между ИС — уменьшаться. Такая ситуация реализуется для переходов RL (рис. 5), сдвиг которых в область меньших энергий достигает 110 meV в исследованном диапазоне периодов гетероструктур (рис. 4).

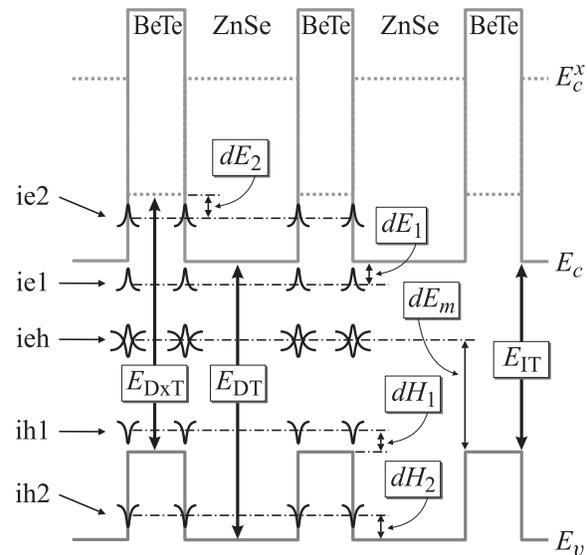
В настоящей работе исследовались гетероструктуры с неэквивалентными интерфейсами вида Zn–Te...Be–Se. Вызванные такой неэквивалентностью поправки к изложенной модели могут быть учтены в рамках теории возмущений при введении в уравнение Шредингера (3) возмущающего потенциала вида  $V(x) = \beta[\delta(x+a) - \delta(x-a)]$ . Однако при этом характер зависимости энергии основного состояния от рас-

стояния между интерфейсами не изменится. В зависимости от соотношения расстояния между интерфейсами и характерной длины  $L$  (при сближении интерфейсов) абсолютное значение энергии основного состояния либо не будет меняться заметным образом, либо будет увеличиваться, понижая тем самым энергию оптических переходов между интерфейсными состояниями.

Оценим диапазон значений, в котором лежат уровни энергии ИС (рис. 8). В случае наиболее длиннопериодной структуры с толщиной слоев 230 Å/115 Å энергии ИС будут наиболее близки к энергии соответствующих ИС на одиночном гетеропереходе. При этом можно записать

$$\begin{cases} dE_1 + dH_1 = E_{IT} - E_{RL} \approx 1.90 \text{ eV} - 1.80 \text{ eV} \approx 100 \text{ meV}, \\ dE_1 + dH_2 = E_{DT} - E_{BL} \approx 2.80 \text{ eV} - 2.75 \text{ eV} \approx 50 \text{ meV}, \\ dE_2 + dH_1 = E_{DXT} - E_{GL} \approx 2.55 \text{ eV} - 2.47 \text{ eV} \approx 80 \text{ meV}. \end{cases} \quad (11)$$

Здесь  $dE_1$  и  $dE_2$  — уровни энергии электронных ИС  $ie1$  и  $ie2$ , отсчитываемые от краев зоны проводимости ZnSe и X-долины BeTe соответственно (рис. 8);  $dH_1$  и  $dH_2$  — уровни энергии дырочных ИС, отсчитываемые от краев валентной зоны тяжелых и легких дырок ZnSe и BeTe соответственно;  $E_{RL}$ ,  $E_{BL}$  и  $E_{GL}$  — энергии оптических переходов между электронными и дырочными ИС  $ie1-ih1$ ,  $ie1-ih2$  и  $ie2-ih1$  соответственно;  $E_{DT}$  и  $E_{DXT}$  — энергии пространственно прямых межзонных оптических переходов в слоях ZnSe и BeTe;  $E_{IT}$  — энергия пространственно непрямых межзонных переходов в исследованных гетероструктурах. Система



**Рис. 8.** К оценке энергетического положения интерфейсных состояний относительно краев зон ZnSe и BeTe. Пунктирная ломаная — уровень X-долины зоны проводимости. Сплошные ломаные:  $E_c$  — уровень зоны проводимости в  $\Gamma$ -точке,  $E_v$  — уровень валентной зоны тяжелых и легких дырок.

уравнений (11) легко преобразуется к виду

$$\begin{aligned} dH_1 - dH_2 &= 50 \text{ meV}, \\ dE_1 - dE_2 &= 20 \text{ meV}, \\ dE_1 + dH_2 &= 50 \text{ meV}. \end{aligned} \quad (12)$$

С учетом неотрицательности введенных величин из системы уравнений (12) получаем диапазоны возможных значений энергий локализации ИС в исследованной системе

$$\begin{cases} 20 < dE_1 < 50 \text{ meV}, \\ 50 < dH_1 < 80 \text{ meV}, \\ dE_2 < 30 \text{ meV}, \\ dH_2 < 30 \text{ meV}. \end{cases} \quad (13)$$

В свою очередь энергия  $dE_m$  интерфейсного состояния  $ie_h$ , отсчитываемая от потолка валентной зоны тяжелых и легких дырок BeTe (рис. 8), определяется выражением

$$E_{YL} = dE_m + \delta E_v - dH_2. \quad (14)$$

Здесь  $E_{YL}$  — энергия оптических переходов между ИС  $ie_h$  и дырочным ИС  $ih_2$ ;  $\delta E_v$  — величина разрыва валентной зоны тяжелых и легких дырок в исследованных гетероструктурах;  $dH_2$  — энергия дырочного ИС  $ih_2$ . Из (13) и (14) получаем, что энергия состояния  $ie_h$  лежит в интервале

$$1.25 < dE_m < 1.28 \text{ eV}.$$

Отметим, что данный энергетический уровень находится сравнительно близко (на 90 meV ниже) к середине между серединами запрещенных зон ZnSe и BeTe и далеко от краев зон этих материалов. Это указывает на то, что данное состояние, по-видимому, является состоянием смешанного типа в отличие от ИС  $ie_1$ ,  $ie_2$ ,  $ih_1$  и  $ih_2$  — спутниковых зон проводимости и валентной зоны полупроводников, составляющих исследованные гетероструктуры.

## 5. Заключение

В данной работе методом эллипсометрии исследованы низкотемпературные спектральные зависимости, отвечающие латеральной оптической анизотропии периодических гетероструктур ZnSe/BeTe с неэквивалентными интерфейсами. Исследовались гетероструктуры с различным периодом. В спектрах латеральной оптической анизотропии обнаружены два типа особенностей, отвечающие оптическим переходам с энергиями, лежащими в области запрещенной зоны. По сравнению с межзонными оптическими переходами спектральное положение особенностей первого типа не зависит от периода исследованных гетероструктур. Особенности второго типа при уменьшении периода гетероструктур испытывают монотонный сдвиг в область низких энергий, сравнимый

с увеличением энергии межзонных оптических переходов вследствие размерного квантования. Наблюдаемое поведение интерпретируется в рамках модели, учитывающей существование двух типов электронных и двух типов дырочных таммовских интерфейсных состояний, а также интерфейсного состояния смешанного типа. Локализация таких состояний вдоль оси роста гетероструктуры обусловлена резким скачком свойств периодического потенциала кристалла на гетероинтерфейсе. В рамках метода эффективной массы — при рассмотрении интерфейса в качестве  $\delta$ -функционального притягивающего потенциала — продемонстрировано уменьшение энергии оптических переходов между интерфейсными состояниями с уменьшением периода гетероструктур. Анализ энергий оптических переходов между интерфейсными состояниями позволил определить диапазон, в котором лежат уровни энергии интерфейсных состояний.

## Список литературы

- [1] I. Tamm. Phys. Zs. Sowjetunion **1**, 733 (1932).
- [2] H.M. Kames. Phys. Rev. **76**, 1611 (1949).
- [3] А.А. Горбачевич, И.В. Токачлы. ЖЭТФ **67**, 6, 393 (1998).
- [4] M.O. Nestoklon. Int. J. Nanosci. **2**, 6, 411 (2003).
- [5] H. Kroemer, C. Nguyen, B. Brar. J. Vac. Sci. and Tech. B **10**, 4, 1769 (1992).
- [6] O. Krebs, P. Voisin. Phys. Rev. Lett. **77**, 9, 1829 (1996); A.V. Platonov, V.P. Kochereshko, E.L. Ivchenko, G.V. Mikhailov, D.R. Yakovlev, M. Keim. W. Ossau, A. Waag, G. Landwehr. Phys. Rev. Lett. **83**, 17, 3546 (1999).
- [7] А.С. Гуревич, В.П. Кочерешко, А.В. Платонов, А. Ваг, Д.Р. Яковлев, Г. Ландвер. ФТТ **46**, 4, 759 (2004).
- [8] H.J. Lozykowski, V.K. Shastri. J. Appl. Phys. **69**, 5, 3235 (1991).
- [9] J.R. Chelikowsky, M.L. Cohen. Phys. Rev. B **14**, 2, 556 (1976).
- [10] M. Nagelstraßer, H. Dröge, H.-P. Steinrück, F. Fischer, T. Litz, A. Waag, G. Landwehr, A. Fleszar, W. Hanke. Phys. rev. B **58**, 16, 10 394 (1998).
- [11] A. Fleszar, W. Hanke. Phys. Rev. B **62**, 4, 2466 (2000).
- [12] Е.Л. Ивченко, А.А. Торопов, П. Вуазен. ФТТ **40**, 10, 1925 (1998)
- [13] P.S. Hauge. Surf. Sci. **96**, 1, 108 (1980).
- [14] Э. Борн, И. Вольф. Основы оптики. Наука, М. (1970). 885 с. [M. Born, E. Wolf. Principles of Optics. 4th ed. Pergamon, Oxford (1969)].
- [15] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus. Superlattices and other heterostructures. Symmetry and optical phenomena. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (1997). 382 p.
- [16] P. Lautenschlager, M. Garriga, S. Logothetidis, M. Cardona. Phys. Rev. B **35**, 17, 9174 (1987).
- [17] H. Luo, N. Dai, F.C. Zhang, N. Samarth, M. Dobrowolska, J.K. Furdyna, C. Parks, K. Ramdas. Phys. Rev. Lett. **70**, 9, 1307 (1993).
- [18] A.V. Rodina, A.Yu. Alekseev, A.L. Efros, M. Rosen, B.K. Meyer. Phys. Rev. B **65**, 125 302 (2002).
- [19] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. „Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике“. Наука, М. (1971). 544 с.
- [20] Э.Е. Тахтамир, В.А. Волков. ЖЭТФ **116**, 5, 1843 (1999).