

ИК-спектроскопия решеточных колебаний сверхрешеток ZnTe/CdTe с квантовыми точками на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe

© С.П. Козырев[¶]

Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
119991 Москва, Россия

(Получена 12 мая 2008 г. Принята к печати 19 мая 2008 г.)

Представлены результаты анализа спектров решеточного ИК-отражения от многопериодных сверхрешеток ZnTe/CdTe с квантовыми точками CdTe, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe. Благодаря многопериодности сверхрешеток удалось наблюдать моды CdTe-подобных колебаний в „квантовых точках“ — бездислокационных напряженных островках, образующихся в процессе роста при релаксации упругих напряжений между слоями ZnTe и CdTe с сильно различающимися решеточными параметрами. Сдвиги частот мод CdTe- и ZnTe-подобных колебаний относительно значений ненапряженного материала позволили оценить степень наличия упругих напряжений.

PACS: 78.67.Hc, 78.40.Fy

1. Введение

При выращивании многослойных структур (например, сверхрешеток) в системе материалов с сильно различающимися решеточными параметрами (постоянной решетки) упругие напряжения играют определяющую роль при формировании смежной области между слоями — области интерфейса. Для каждой пары материалов смежных слоев существует понятие „критической толщины“. При выращивании сверхрешетки из слоев толщиной более „критической толщины“ упругие напряжения, возникающие на начальном этапе роста из-за различия решеточных параметров смежных слоев, релаксируют через образование дислокаций несоответствия, и каждый слой такой сверхрешетки характеризуется свойствами объемного ненапряженного материала. Для слоев с толщиной менее „критической толщины“ упругие напряжения сохраняются в сверхрешетке, а сама сверхрешетка может быть выращена когерентно с подложкой или буферным слоем, т.е. иметь по всей структуре одинаковые в плоскости роста решеточные параметры. Для таких сверхрешеток характерно очень высокое качество интерфейса. При выращивании многослойной структуры с тонкими слоями (толщиной порядка „критической“ и менее) одного материала на толстых слоях другого материала возможен другой механизм релаксации упругих напряжений — через образование в тонком слое бездислокационных напряженных островков (например, [1,2] с соответствующими ссылками). Причем если тонким слоем является сплав (твердый раствор), то образуются островки с составом, сильно отличающимся от состава слоя, а индуцированная упругими напряжениями сегрегация в островках способствует резкому увеличению скорости роста. При выращивании традиционных планарных электронных приборов эти эффекты создают множество проблем, но эти же эффекты в настоящее время используются для создания структур

с самоорганизующимися „квантовыми точками“ (КТ). При их выращивании именно упругие напряжения ответственны за формирование островков — „квантовых точек“, их форму и электронную структуру. В этом отношении представляют интерес свойства многослойных структур с КТ для пары полупроводниковых материалов CdTe/ZnTe. Особенность этой гетеропары состоит в том, что скачок потенциала в валентной зоне практически полностью определяется упругими напряжениями, возникающими из-за большого различия решеточных параметров CdTe и ZnTe [3]. Изменяя распределение упругих напряжений за счет вариации параметров структуры, таких как материал буферного слоя или толщина барьерных слоев ZnTe, между которыми находится слой КТ CdTe, появляется дополнительная возможность управлять электронными свойствами структуры вплоть до изменения типа зонной диаграммы. Например, в работе [4] авторы столкнулись с необычной ситуацией, когда для сверхрешетки КТ CdTe с барьерными слоями ZnTe малой толщины на толстом буферном слое CdTe спектр фотолюминесценции характеризовался двумя типами экситонных состояний — пространственно прямыми и пространственно непрямыми.

Ранее, используя методы длинноволновой инфракрасной (ИК) спектроскопии [5] и фотолюминесценции [6], мы исследовали колебательные и электронные состояния в структурах с множественными плоскостями КТ CdTe между барьерными слоями ZnTe, называемых сверхрешетками квантовых точек (СРКТ), выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках GaAs(100) с толстым буферным слоем CdTe. СРКТ состояла из 200 периодов слоев CdTe с номинальной ростовой толщиной 2.5 монослоя (ML), разделенных барьерами ZnTe с толщиной от 12 до 75 ML. Анализ выращенных структур методом просвечивающей электронной микроскопии в направлении роста показал [7], что отдельный слой КТ CdTe представляет собой слой твердого раствора $Zn_{1-x}Cd_xTe$, в котором распределены островки диаметром до 10 нм и толщиной

[¶] E-mail: skozyrev@sci.lebedev.ru

Таблица 1. Параметры исследуемых структур СРКТ

Structure	b05	b50	b0	b10.20	b10.200
Buffer layer	ZnTe	ZnTe	ZnTe(+CdTe)	ZnTe(+CdTe)	ZnTe(+CdTe)
CdTe layer thickness, ML	3	3	3	3	3
ZnTe spacer thickness, ML	5	50	—	10	10
Number of CdTe layers	400	100	1	20	200

около 2 нм с повышенным содержанием CdTe. При толщинах барьерного слоя ZnTe менее 25 ML проявляется корреляция в распределении этих островков между слоями КТ CdTe и в пределах слоя. Спектр фотолюминесценции [6] в зависимости от толщины барьерного слоя ZnTe (и соответствующего распределения упругих напряжений в структуре) характеризуется либо пространственно непрямыми экситонными переходами для структур с толстыми барьерными слоями, либо двумя типами экситонных состояний (пространственно непрямыми и пространственно прямыми) для структур с малыми толщинами барьерных слоев ZnTe.

ИК-спектроскопия решеточных колебаний [5] позволила оценить распределение упругих напряжений в структурах СРКТ по сдвигам частот собственных колебаний для материалов, образующих эти структуры. Исследованные структуры СРКТ на подложках с буферным слоем CdTe [5] характеризуются интенсивными полосами отражения, связанными с колебательными возбуждениями в подложке GaAs, в барьерных слоях ZnTe и в буферном слое CdTe. Обнаружено отщепление дополнительной моды от основной моды ZnTe, связанное с проявлением ZnTe-подобной моды образовавшегося в слое КТ CdTe твердого раствора ZnCdTe за счет взаимодиффузии Zn и Cd на границах раздела. Моду колебательного возбуждения КТ CdTe обнаружить не удалось из-за сильного экранирования колебательной модой толстого буферного слоя CdTe. Анализ спектров решеточного ИК-отражения от структур с множественными плоскостями КТ CdTe между барьерными слоями ZnTe показал, что для структур с большими толщинами барьерных слоев ZnTe (25 и более ML) между плоскостями КТ CdTe упругие напряжения сосредоточены в слоях твердого раствора $Zn_{1-x}Cd_xTe$. Для малых толщин ZnTe (12 и менее ML) картина распределения упругих напряжений более сложная в силу того, что в сверхрешетках из слоев КТ CdTe, разделенных барьерными слоями ZnTe малой толщины, влияние толстого буферного слоя CdTe распространяется на всю СРКТ.

В настоящей работе представлено дальнейшее исследование структур с множественными плоскостями КТ CdTe между слоями ZnTe разной толщины на подложке GaAs с толстым буферным слоем ZnTe. Замена буферного слоя CdTe слоем ZnTe позволила наблюдать в исследуемых структурах СРКТ моды колебательного возбуждения КТ CdTe (в действительности, моды твердого раствора CdZnTe, обогащенного CdTe), харак-

теризуемые большим сдвигом собственной частоты по отношению к объемным значениям. Причем частотный сдвиг определяется не изменением n -мерности слоя, а наличием больших упругих напряжений. Замена буферного слоя CdTe слоем ZnTe приводит к значительному изменению спектра колебательных возбуждений и соответствующему изменению распределения упругих напряжений для аналогичных сверхрешеток квантовых точек CdTe/ZnTe на подложке с различным буферным слоем. Частично результаты анализа ИК спектров решеточного отражения исследуемых структур СРКТ на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe (в частности, наличие моды $\sim 150 \text{ см}^{-1}$, соответствующей CdTe-подобному колебанию в слое КТ CdTe) были опубликованы в работе [8], где исследовались электронные и колебательные состояния структур СРКТ на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe. При дальнейшем изложении будут использованы результаты исследования спектров фотолюминесценции СРКТ работы [8].

2. Дисперсионный анализ спектров решеточного ИК-отражения

Структуры КТ выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующих подложках GaAs(100) с буферным слоем ZnTe толщиной 5 мкм при температуре подложки 350°C. СРКТ состояла из различного числа слоев CdTe с номинальной ростовой толщиной 3 ML, разделенных барьерными слоями ZnTe с толщиной от 5 до 50 ML для различных образцов. Сверху осаждался защитный слой ZnTe толщиной 40 нм. Технология выращивания структур СРКТ ранее была описана в [5,7]. Параметры исследуемых структур и обозначения структур такие же, как в [8], и представлены в табл. 1.

Спектры длинноволнового ИК отражения при 300 К регистрировались на фурье-спектрометре IFS 113v фирмы Bruker со спектральным разрешением около 1 см^{-1} . Поскольку дальнейшее обсуждение будет связано с анализом решеточных колебаний, спектр которых экспериментально получают в основном из ИК-отражения в длинноволновой области, следует отметить некоторые особенности спектроскопии решеточного отражения, где взаимодействие с колебаниями кристаллической решетки осуществляется ИК-излучением с длиной волны 30–80 мкм. Для оптимального исследования

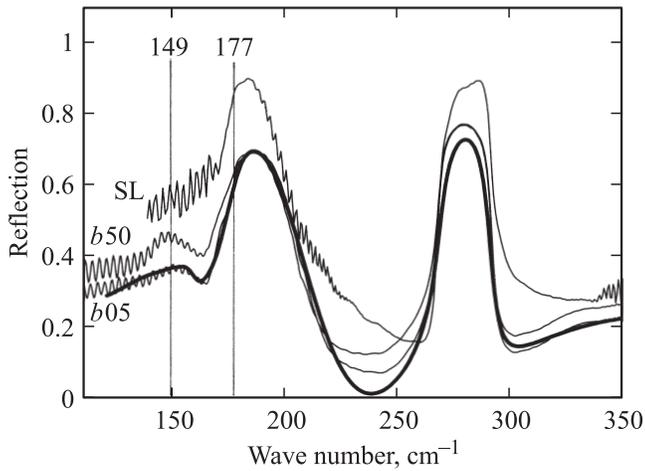


Рис. 1. Спектры решеточного отражения структур СРКТ **b05** и **b50** на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe и напряженной сверхрешетки **SL** ZnTe/Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe [9]. Для ясности спектры смещены относительно друг друга вдоль оси ординат. Для структуры **b05** толстой линией представлен расчетный спектр.

решеточных колебаний толщина исследуемой структуры на толстой подложке должна составлять 2–5 мкм. К сожалению, именно по этой причине из-за нехватки чувствительности невозможно исследовать короткопериодные СРКТ, — необходимо выращивать повторяющиеся структуры с числом периода около 100. Спектр решеточного ИК-отражения несет в себе интегральную характеристику обо всех слоях, составляющих исследуемую структуру, и о подложке.

На рис. 1 представлены спектры решеточного отражения двух образцов СРКТ **b05** и **b50** на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe толщиной ~ 5 мкм. Там же показан спектр решеточного отражения для упругонапряженной сверхрешетки **SL** ZnTe(10 нм)/Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te (6 нм) с числом слоев 100 на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe (1.3 мкм) из работы [9]. Для ясности спектры слегка смещены относительно друг друга по оси ординат. За исключением области проявления CdTe-подобных колебаний в окрестности ~ 150 см⁻¹, отсутствующей в спектре **SL** ZnTe/Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te, все особенности спектров СРКТ **b05** и **b50** и **SL** совпадают. Мода 269 см⁻¹ соответствует моде решеточного колебания объемного GaAs, а мода ~ 177 см⁻¹ — результат наложения двух ZnTe-подобных мод колебаний. В [9] было показано, что сверхрешетка **SL** ZnTe/Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te является упругонапряженной с резкими границами раздела слоев. В испытываемых растягивающее напряжение слоях ZnTe частота собственных колебаний изменяется от 179 до 176 см⁻¹, а в слоях Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te под действием сжимающих напряжений частота увеличивается от 173 до 177 см⁻¹. Частоты решеточных колебаний в упругонапряженных слоях сверхрешетки **SL** близки друг к другу и при параметре затухания решеточных мод $\gamma \approx 3$ см⁻¹ спектрально не разрешаются даже при

гелиевых температурах [9]. Из подобия решеточных спектров СРКТ **b05** и **b50** и **SL** следует, что при наращивании в рассматриваемых СРКТ слоя CdTe на более толстый слой ZnTe образуется слой твердого раствора ZnCdTe переменного состава (а не слой CdTe), в котором релаксация упругих напряжений в соответствии с [2] сопровождается образованием островков ZnCdTe с усиленной в них сегрегацией CdTe. И островки эти распределены в слое с преимущественным составом ~ Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te. Мода ~ 150 см⁻¹ в СРКТ соответствует CdTe-подобному колебанию „квантовых точек“ — островков ZnCdTe, обогащенных CdTe.

Для проведения дисперсионного анализа спектров решеточного отражения сверхрешеток использовалась модельная структура, образованная тонкой пленкой (сверхрешетка + буферный слой) поверх объемной (полубесконечной) подложки. В рамках такой модельной структуры для пленки толщиной L с диэлектрической функцией $\epsilon_f(\omega)$ и подложки с диэлектрической функцией $\epsilon_s(\omega)$ при нормальном падении света амплитудный коэффициент отражения имеет вид [10]

$$r_{1fs}(\omega) = \frac{r_{1f}(\omega) + r_{fs}(\omega) \cdot \exp(i2\beta)}{1 + r_{1f}(\omega) \cdot r_{fs}(\omega) \cdot \exp(i2\beta)}, \quad (1)$$

где

$$r_{1f}(\omega) = \frac{1 - \sqrt{\epsilon_f(\omega)}}{1 + \sqrt{\epsilon_f(\omega)}}, \quad r_{fs}(\omega) = \frac{\sqrt{\epsilon_f(\omega)} - \sqrt{\epsilon_s(\omega)}}{\sqrt{\epsilon_f(\omega)} + \sqrt{\epsilon_s(\omega)}}$$

$$\text{и } \beta = \frac{2\pi L \sqrt{\epsilon_f(\omega)}}{\lambda},$$

λ — длина волны ($= 10\,000/\omega$). Коэффициент отражения $R(\omega) = |r_{1fs}(\omega)|^2$. В модельном расчете не учитывается многократное отражение на границах раздела из-за громоздкости выражения, которое не дает дополнительной информации о решеточных колебаниях в пленке, кроме учета интерференционных эффектов. На рис. 1 интерференция на подложке GaAs толщиной ~ 500 мкм проявляется в виде частых осцилляций с периодом примерно 2.5 см⁻¹ в области прозрачности подложки и пленки (сверхрешетка + буферный слой).

Диэлектрическая функция пленки $\epsilon_f(\omega)$ рассматривается в классической аддитивной форме:

$$\epsilon_f(\omega) = \epsilon_\infty + \sum_j \frac{S_j \omega_{ij}^2}{\omega_{ij}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_j}. \quad (2)$$

При расчете коэффициента отражения $R(\omega)$ в формуле $\epsilon_f(\omega)$ варьировались частота j -й ТО моды ω_{ij} , ее сила осциллятора S_j и параметр затухания γ_j . Результаты дисперсионного анализа для СРКТ **b05** и **b50** представлены в табл. 2.

Для CdTe-подобных колебаний в „квантовых точках“ проявляются две моды с частотами ~ 150 и ~ 156 см⁻¹, соответствующие группам мелких и крупных островков ZnCdTe, обогащенных CdTe, которые наблюдаются в

Таблица 2. Параметры решеточных колебаний (частота ТО моды ω_j , ее сила осциллятора S_j и параметр затухания γ_j), рассчитанные из дисперсионного анализа спектра решеточного отражения

Structure	b05	b50	b0	b10.20	b10.200
Substrate GaAs	269/1.8/6	269/1.9/5	267/1.9/11	267/1.9/12	267/1.9/12
$\omega_l, \text{cm}^{-1}/S/\gamma, \text{cm}^{-1}$					
CdTe-like modes	150/0.8/12	149/0.4/13	149/0.5/9	149/0.55/11	149/0.5/14
$\omega_l, \text{cm}^{-1}/S/\gamma, \text{cm}^{-1}$	157/0.25/11	156/0.5/13		144/0.2/7	144/0.2/7
ZnTe-like modes	174/1.2/13	175/1.1/8	168/0.07/7	168/0.15/8	170/0.3/9
$\omega_l, \text{cm}^{-1}/S/\gamma, \text{cm}^{-1}$	178/0.7/10	179/0.8/11	179/0.5/7.5	178.5/0.6/10	177/0.7/11

Примечание. Объемные величины частот ТО колебательных мод: $\omega_l^{\text{GaAs}} = 270 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_l^{\text{CdTe}} = 140 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_l^{\text{ZnTe}} = 179 \text{ cm}^{-1}$.

СРКТ с помощью просвечивающей электронной микроскопии [7]. В зависимости от размера компонентный состав КТ (степень сегрегации в них CdTe) и соответственно величина упругих напряжений в них различны. А величиной упругих напряжений определяется частотный сдвиг решеточных колебаний.

На рис. 2 представлены спектры решеточного отражения структур СРКТ **b10.20** и **b10.200** на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe толщиной $\sim 5 \text{ мкм}$, а их параметры, такие же как в работе [8], представлены в табл. 1. В структурах **b10.20** и **b10.200** тонкие слои CdTe расположены между барьерными слоями ZnTe с одинаковой ростовой толщиной 10 ML, и структуры отличаются только числом периодов, 20 и 200 соответственно. Там же на рисунке показан спектр решеточного отражения образца **b0** — подложки GaAs с буферным слоем ZnTe, на который осаждались один тонкий слой CdTe и защитный слой ZnTe толщиной 40 нм. Для решеточного ИК-отражения образец **b0** — это подложка GaAs с буферным слоем ZnTe и по отношению к

остальному ИК-спектру не чувствителен. Однако при анализе спектра решеточного отражения от образца **b0** выяснилось наличие дополнительного слоя CdTe толщиной $\sim 1 \text{ мкм}$ между подложкой GaAs и буферным слоем ZnTe с толщиной $\sim 5 \text{ мкм}$, что позже было подтверждено дополнительными исследованиями. На рис. 2 дополнительному слою CdTe соответствует решеточная мода 149 cm^{-1} , отличная от 140 cm^{-1} для ненапряженного CdTe. Эта мода проявляется и в спектрах СРКТ **b10.20** и **b10.200**. Дополнительный слой CdTe (решеточный параметр $a = 6.48 \text{ \AA}$) находится в сильно сжатом состоянии между подложкой GaAs ($a = 5.56 \text{ \AA}$) и толстым буферным слоем ZnTe ($a = 6.10 \text{ \AA}$) из-за большого различия решеточных параметров. Наличие заглубленного сильно напряженного слоя CdTe приводит к смещению частоты решеточной моды толстой подложки GaAs от $\omega_l = 269$ к 267 cm^{-1} и дополнительной напряженной области (пик $\omega_l = 168 \text{ cm}^{-1}$) в буферном слое ZnTe. Основная мода буферного слоя ZnTe — $\omega_l = 179 \text{ cm}^{-1}$. Спектры решеточного отражения структур СРКТ **b10.20** и **b10.200** по отношению к спектру **b0** характеризуются дополнительными модами с $\omega_l = 144 \text{ cm}^{-1}$ (моды CdTe КТ) и с $\omega_l = 169 \text{ cm}^{-1}$ (моды ZnTe-подобных колебаний слоя ZnCdTe). Данные дисперсионного анализа спектров решеточного ИК-отражения структур СРКТ **b10.20** и **b10.200** на подложке GaAs с комбинированным буферным слоем ZnTe(+CdTe) и самой подложки GaAs с буферным слоем ZnTe(+CdTe) **b0** представлены в табл. 2.

Ранее в работе [8], где исследовались электронные и колебательные состояния тех же структур СРКТ на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe, что и в настоящей работе, отмечалось сильное различие по интенсивности, форме и положению полос в спектре фотолуминесценции для двух, казалось бы, подобных структур **b05** и **b10.200**. Первая структура **b05** состоит из 400 ML CdTe между слоями ZnTe толщиной 0.5 ML, вторая структура **b10.200** — из 200 ML CdTe между слоями ZnTe толщиной 10 ML. Настоящий анализ спектров решеточного отражения структур **b05** и **b10.200** указывает, что первая структура формировалась на буферном слое ZnTe, а вторая — на буферном слое ZnTe(+CdTe) с заглубленным слоем CdTe. Значения частот CdTe-

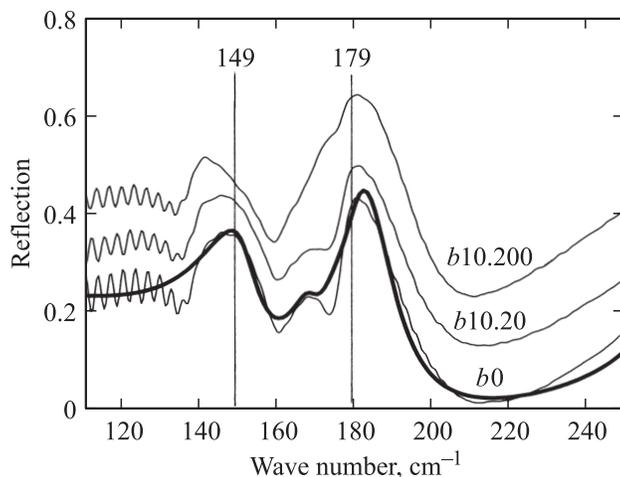


Рис. 2. Спектры решеточного отражения структур СРКТ **b10.20** и **b10.200** на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe(+CdTe) и подложки GaAs с буферным слоем ZnTe(+CdTe) **b0**. Для ясности спектры смещены относительно друг друга вдоль оси ординат. Для **b0** толстой линией представлен расчетный спектр.

подобных колебаний в „квантовых точках“ для структуры **b05** равны $\omega_t \approx 150$ и 156 см^{-1} , а для структуры **b10-200** — $\omega_t = 144 \text{ см}^{-1}$ (для ненапряженного CdTe $\omega_t = 140 \text{ см}^{-1}$), что отражает разницу в распределении упругих напряжений в структурах на подложке с буферными слоями ZnTe и ZnTe(+CdTe). Примечательно, что частоты ω_t мод решеточных колебаний в слоях КТ CdTe для СРКТ на подложке с одинаковым буферным слоем слабо зависят от толщины барьерных слоев ZnTe.

3. Расчет сдвига частот оптически активных мод решеточных колебаний в СРКТ под воздействием напряжений

При обсуждении результатов дисперсионного анализа спектров решеточного отражения СРКТ предполагалось, что сдвиги частот колебательных мод слоев СРКТ вызваны упругими напряжениями между слоями сверхрешетки. Сделаем теоретические оценки сдвига частот $\Delta\omega_t$ колебательных поперечных мод ω_t в слоях под воздействием упругих напряжений исходя из соотношений, представленных в [11]:

$$\frac{\Delta\omega_t}{\omega_t} = \frac{1}{2(1-\gamma^*)} \left[\frac{\Delta K_t}{K_0} - \gamma^*(\delta_v + \delta_d) \right] \approx \frac{1}{2(1-\gamma^*)} \frac{\Delta K_t}{K_0} = k \left(-\frac{\Delta a}{a} \right), \quad (3)$$

где

$$\frac{\Delta K_t}{K_0} = \left(1 - \frac{2\rho}{R_0} \right)^{-1} \left[\frac{2R_0}{3\rho} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) - \frac{2}{3} \left(1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}} \right) - \frac{2\rho}{R_0} \right] \left(-\frac{\Delta a}{a} \right),$$

$$\frac{R_0}{\rho} = 16\sqrt{3} \cdot B \frac{R_0^4}{\alpha(e^*)^2} + 2, \quad B = (C_{11} + 2C_{12})/3,$$

$$\alpha = 1.6381, \quad \gamma^* = [(\omega_l/\omega_t)^2 - 1] / [(\omega_l/\omega_t)^2 + 2].$$

Здесь a и Δa — постоянная решетки и ее изменение вдоль плоскости слоев. Расчет в [11] проводился в приближении модели жестких ионов. ρ/R_0 — отношение параметра отталкивающего потенциала к расстоянию $R_0 (= a\sqrt{3}/4)$ между ближайшими соседями в материале без деформации, C_{11}, C_{12} — упругие константы, B — объемный модуль упругости, e^* — эффективный ионный заряд, ω_t и ω_l — частоты поперечного и продольного фононов. Член $\gamma^*(\delta_v + \delta_d)$ в уравнении (3) учитывает изменения вкладов кулоновского взаимодействия из-за изменений объема элементарной ячейки и факторов деполяризации, и он мал по сравнению с $\Delta K_t/K_0$, определяемым параметром ρ/R_0 . Пренебрежение этим членом приводит к ошибке, не превышающей 10%.

Значения постоянной решетки a , упругих констант C_{11}, C_{12} , эффективного ионного заряда e^* представлены

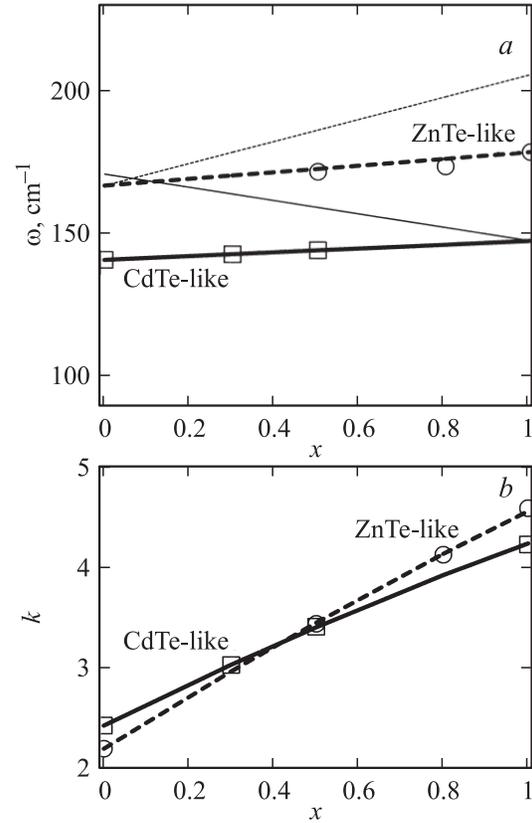


Рис. 3. *a* — распределение частот ТО и LO мод CdTe-подобных (сплошной линией) и ZnTe-подобных (штриховой линией) колебаний в твердом растворе $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ в зависимости от состава x при $T = 300 \text{ К}$ [13]. ТО моды изображены толстой линией, LO моды — тонкой. *b* — зависимость рассчитанного коэффициента пропорциональности k между деформацией $\Delta a/a$ и относительным сдвигом частоты колебательной моды $\Delta\omega_t/\omega_t$ от состава x для CdTe- и ZnTe-подобных колебаний $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. Для CdTe-подобных колебаний зависимость изображена сплошной линией, для ZnTe-подобных колебаний — штриховой. Точками показаны значения для тех составов x , для которых проводились расчеты.

в табл. 3. Значения параметров для CdTe ($x = 0$) и ZnTe ($x = 1$) использовались в [12] для расчета динамики кристаллической решетки и дисперсии фононов в рамках 11-параметрической модели жестких ионов при интерпретации результатов по нейтронному рассеянию. Для твердого раствора $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ состава x проводилась интерполяция расчетных значений параметров в соответствии с формулой $C(x) = (1-x) \cdot C^{\text{CdTe}} + x \cdot C^{\text{ZnTe}}$, где C — упругие константы C_{11} и C_{12} , постоянная решетки a твердого раствора или эффективный ионный заряд e^* . На рис. 3, *a* показано распределение колебательных ТО и LO мод по частоте для CdTe- и ZnTe-подобных колебаний твердого раствора $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ в зависимости от состава x при $T = 300 \text{ К}$ [13], а на рис. 3, *b* — зависимость от состава x , рассчитанного согласно (3) коэффициента пропорциональности k между деформацией $\Delta a/a$ и относительным сдвигом частоты

Таблица 3. Параметры, используемые для расчета относительного сдвига частоты колебательной ТО моды $\Delta\omega_i/\omega_i$, индуцированного упругими напряжениями

Cd _{1-x} Zn _x Te	<i>a</i> (Å)	<i>C</i> ₁₁ (10 ¹¹ dyn/cm ²)	<i>C</i> ₁₂ (10 ¹¹ dyn/cm ²)	<i>e</i> [*]	ω_i (cm ⁻¹)	ω_l (cm ⁻¹)
<i>x</i> = 0 (CdTe)	6.482	5.35	3.68	0.867	141	171
<i>x</i> = 0.3 CdTe-like	6.369	5.88	3.80	0.837	143	161
<i>x</i> = 0.5 CdTe-like	6.293	6.235	3.87	0.816	144.5	157.5
<i>x</i> = 0.5 ZnTe-like	6.293	6.235	3.87	0.816	172	185
<i>x</i> = 0.8 ZnTe-like	6.180	6.765	3.99	0.785	174	196
<i>x</i> = 1 (ZnTe)	6.104	7.12	4.07	0.766	179	206

колебательной моды $\Delta\omega_i/\omega_i$ для CdTe- и ZnTe-подобных колебаний Cd_{1-x}Zn_xTe.

Постоянная решетки слоев a^\perp в латеральном направлении оценивалась в приближении равновесия двух натянутых друг на друга упругих слоев: (1) и (2) со свободными поверхностями [14]:

$$a^\perp = \frac{n_1 a_1^2 K_1 + n_2 a_2^2 K_2}{n_1 a_1 K_1 + n_2 a_2 K_2}, \quad K_i = \frac{1}{S_{11i} + S_{12i}}, \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

где n_i — количество монослоев, a_i — постоянная решетки i -слоя, S_{11} и S_{12} — модули упругости, связанные с упругими константами C_{11} и C_{12} соотношениями:

$$S_{11} - S_{12} = \frac{1}{C_{11} - C_{12}}, \quad S_{11} + 2S_{12} = \frac{1}{C_{11} + 2C_{12}}.$$

Дальнейшая интерпретация результатов измерений рассматривалась с учетом выводов работы [15] по структурному анализу наноструктур CdSe/ZnSe с помощью просвечивающей электронной микроскопии. Наноструктуры CdSe/ZnSe и CdTe/ZnTe являются во многих отношениях (свойств структурных, решеточных колебаний и др.) подобными, но наноструктуры CdSe/ZnSe более изучены. Авторы [15] исследовали слои CdSe с ростовой толщиной от 0.5 до 3.0 ML, заглубленные в матрицу ZnSe, и обнаружили двумерные слои Zn_{1-x}Cd_xSe толщиной ~ 3 нм (~ 10 ML) — шириной концентрационного профиля на 1/2 высоты распределения — для всех образцов вне зависимости от ростовой толщины слоя CdSe. Эти слои содержали включения (островки) с большим содержанием Cd, которые распределялись по латеральному размеру на малые с величиной ≤ 10 нм и большие с величиной 30–130 нм. Их высота не превышала толщину слоя Zn_{1-x}Cd_xSe. Состав двумерного слоя Zn_{1-x}Cd_xSe и островков, обогащенных CdSe, определялся исходной ростовой толщиной CdSe.

Для всех исследуемых в работе структур СРКТ ростовая толщина слоя CdTe в сверхрешетке одинаковая и равна 3 ML. В работе [7] из анализа подобных рассматриваемым структурам образцов методом электронной микроскопии толщина слоя твердого раствора Zn_{1-x}Cd_xTe в СРКТ была оценена в ~ 2 нм или 6 ML (для CdTe 1 ML = 0.324 нм). Исходя из подобия спектров СРКТ **b05** и **b50** и SL ZnTe/Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te, обсуждаемого ранее, состав слоя твердого раствора Zn_{1-x}Cd_xTe в СРКТ **b05** и **b50** принимался в среднем равным $x = 0.2$. То же —

для СРКТ **b10.20** и **b10.200**. Толщина слоя и обогащенных CdTe островков в нем = 6 ML.

Рассмотрим одну из структур СРКТ **b50**. Для расчета сначала приходится задаться составом твердого раствора. Пусть состав твердого раствора в островке будет Cd_{0.7}Zn_{0.3}Te. Для ненапряженного Cd_{0.7}Zn_{0.3}Te $a = 6.369$ Å, $\omega_i = 143$ см⁻¹. Тогда для пары Cd_{0.7}Zn_{0.3}Te/ZnTe постоянная решетки сопряженных слоев в латеральном направлении, согласно уравнению (4), будет $a^\perp = 6.128$ Å, а $\Delta a/a = (6.128 - 6.369)/6.369$. Для моды CdTe-подобного колебания $\Delta\omega_i/\omega_i = 3.03 \Delta a/a$ (или $\Delta\omega_i/143 = 0.115$) и $\Delta\omega_i = +16$ см⁻¹. Рассчитанная частота (143 + 16) см⁻¹ и наблюдаемая 156 см⁻¹ для CdTe-подобного колебания СРКТ **b50** близки по значению. Следовательно, материалом „квантовых точек“ в **b50** можно считать в среднем Cd_{0.7}Zn_{0.3}Te. Аналогичный расчет для пары Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te/ZnTe в СРКТ **b50** дает значение частоты CdTe-подобного колебания, равное 151.5 см⁻¹, что сравнимо с наблюдаемой частотой 149 см⁻¹. Для ненапряженного Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te частота CdTe-подобной моды равна ~ 147 см⁻¹. Что касается мод ZnTe-подобных колебаний, то наблюдаемая мода 179 см⁻¹ — это мода толстого буферного слоя ZnTe, а моде 175 см⁻¹ соответствуют две близко расположенные неразрешенные моды двух смежных слоев: ZnTe и Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te. Слой твердого раствора Zn_{0.8}Cd_{0.2}Te, как ранее обсуждалось, образуется в результате релаксации упругих напряжений при осаждении CdTe на барьерный слой ZnTe. Образцы СРКТ **b05** и **b50** отличаются друг от друга толщиной барьерного слоя, их спектры решеточных колебаний различаются незначительно.

СРКТ **b10.20** и **b10.200**, в отличие от структур **b05** и **b50** на подложке с буферным слоем ZnTe, формировались на подложке **b0** с комбинированным буферным слоем ZnTe(+CdTe). В структуре **b0** под буферным слоем ZnTe имеется слой CdTe толщиной ~ 1 мкм. Моде решеточных колебаний этого напряженного (сжатого) слоя CdTe соответствует наблюдаемая мода 149 см⁻¹. При осаждении сверхрешетки **b10.20** и **b10.200** появляется дополнительная мода CdTe-подобных колебаний с частотой 144 см⁻¹. Это значение частоты является достаточно низким для упругонапряженной сверхрешетки. Например, в рассмотренной выше СРКТ **b50** частота моды $\omega_i = 156$ см⁻¹. Вероятнее всего, релаксация в этих

СРКТ **b10.20** и **b10.200** осуществлялась в значительной степени через дислокации несоответствия. Для расчета, какой был выполнен для **b50**, эти структуры слишком сложны. На примере СРКТ **b10.20** и **b10.200** видно, насколько критично зависит формирование напряжений СРКТ от материала буферного слоя и его качества.

4. Заключение

Используя метод отражательной ИК-спектроскопии решеточных колебаний, исследовались многопериодные сверхрешетки ZnTe/CdTe с квантовыми точками CdTe, выращенные методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке GaAs с буферным слоем ZnTe. В отличие от предыдущей работы [5], где при исследовании аналогичных структур на подложке с буферным слоем CdTe моды CdTe-подобных колебаний сверхрешетки в спектре не проявлялись, удалось наблюдать моды CdTe-подобных колебаний в упругонапряженных слоях сверхрешетки. Из дисперсионного анализа спектров установлено, что при формировании сверхрешетки из тонких слоев CdTe между барьерными слоями ZnTe в процессе осаждения CdTe образуются слой твердого раствора $Zn_{1-x}Cd_xTe$ с преимущественным составом $x \approx 0.2$ и распределенные в этом слое островки $Zn_{1-x}Cd_xTe$ с повышенным содержанием CdTe. Для некоторых образцов (**b50** и **b05**) из теоретических оценок установлено, что материалом островков („квантовых точек“) является $Cd_{0.7}Zn_{0.3}Te$. Для пары упругосопряженных слоев ZnTe/ $Cd_{0.7}Zn_{0.3}Te$ частота моды CdTe-подобных колебаний в $Cd_{0.7}Zn_{0.3}Te$ увеличивается от 143 (в ненапряженном сплаве) до 156 см^{-1} (наблюдаемая в эксперименте). В этих образцах релаксация напряжений между исходными слоями ZnTe и CdTe сопровождается образованием упругонапряженных (сжатых) бездислокационных островков $Cd_{0.7}Zn_{0.3}Te$. В других образцах частота моды CdTe-подобных колебаний составляет 144 см^{-1} , значительно отличающаяся даже от ненапряженного CdTe, что является указанием на то, что в слоях этих образцов имеют место процессы пластической деформации с образованием дислокаций несоответствия.

Автор выражает благодарность Г. Карчевскому (Институт физики, Польша) за предоставленные образцы СРКТ и Е. Махову за проведение измерений на фурье-спектрометре.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы президиума РАН „Низкоразмерные квантовые структуры“ и РФФИ, проект № 07-02-00899-а.

Список литературы

- [1] J. Tersoff, R.M. Tromp. Phys. Rev. Lett., **70**, 2782 (1993).
- [2] J. Tersoff. Phys. Rev. Lett., **81**, 3183 (1998).
- [3] H. Mathie, A. Chatt, J. Allegre, J.P. Faurie. Phys. Rev. B, **41**, 6082 (1990).

- [4] E.E. Onishchenko, V.S. Bagaev, V.V. Zaitsev, E.I. Makhov. Physica E, **26**, 153 (2005).
- [5] Л.К. Водопьянов, С.П. Козырев, Г. Карчевски. ФТТ, **45**, 1713 (2003).
- [6] В.С. Багаев, Л.К. Водопьянов, В.С. Виноградов, В.В. Зайцев, С.П. Козырев, Н.Н. Мельник, Е.Е. Онищенко, Г. Карчевски. ФТТ, **46**, 171 (2004).
- [7] S. Mackowski, G. Karczewski, T. Wojtowicz, J. Kossut, S. Kret, A. Szczepanska, P. Dluzewski, G. Prechtel, W. Heiss. Appl. Phys. Lett., **78**, 3884 (2001).
- [8] E.E. Onishchenko, V.S. Bagaev, G. Karczewski, S.P. Kozyrev, I.V. Kucherenko, N.N. Mel'nik, V.S. Vinogradov, L.K. Vodop'yanov. Phys. Status Solidi C, **3**, 881 (2006).
- [9] Л.К. Водопьянов, С.П. Козырев, Ю.Г. Садофьев. ФТТ, **45**, 1892 (2003).
- [10] H.W. Verleur. JOSA, **58**, 1356 (1968).
- [11] В.С. Виноградов, Л.К. Водопьянов, С.П. Козырев, Ю.Г. Садофьев. ФТТ, **41**, 1948 (1999).
- [12] P. Plumelle, M. Vandevyver. Phys. Status Solidi B, **73**, 271 (1976).
- [13] Л.К. Водопьянов, Е.А. Виноградов, А.М. Блинов, В.А. Рукавишников. ФТТ, **14**, 268 (1972).
- [14] T. Fromherz, F. Hauzenberger, W. Faschinger, M. Help, P. Juza, H. Sitter, G. Bauer. Phys. Rev. B, **47**, 1998 (1993).
- [15] N. Peranio, A. Rosenauer, D. Gerthsen, S.V. Sorokin, I.V. Sedova, S.V. Ivanov. Phys. Rev. B, **61**, 16 015 (2000).

Редактор Л.В. Беляков

IR spectroscopy of the lattice vibrations for ZnTe–CdTe quantum dot superlattice on GaAs substrate with ZnTe buffer layer

S.P. Kozyrev

Lebedev Physical Institute,
Russian Academy of Sciences,
119991 Moscow, Russia

Abstract Results of analysis of lattice IR reflection spectra are given for multilayer ZnTe–CdTe quantum-dot superlattices grown by molecular beam epitaxy on GaAs substrate with ZnTe buffer layer. CdTe-like lattice modes are observed in „quantum dots“ — dislocation-free strained islands, which nucleates because of strain relaxation in ZnTe and CdTe layers of highly lattice-mismatched system. The strain-induced shifts of TO-phonon frequencies of CdTe-like and ZnTe-like vibrations allowed one to obtain information on elastic strains.