

УДК 535.343.2

©1994

ДЛИННОВОЛНОВАЯ ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ СВЕРХРЕШЕТОК HgTe–CdTe

С. П. Козырев

Рассмотрен метод анализа спектров решеточного отражения от структуры сверхрешетка/подложка на примере спектров решеточного отражения сверхрешеток HgTe–CdTe, использующих свойства объемных решеточных мод Hg–Te и Cd–Te колебаний сплава $Hg_{1-x}Cd_xTe$. В общем случае структуры пленка/подложка в области прозрачности подложки спектр отражения воспроизводит дисперсию диэлектрической функции пленки (ее мнимой части), если толщина пленки много меньше длины волны. На основе анализа спектров решеточного отражения представлена модельная композиционная структура сверхрешеток HgTe–CdTe.

Необычная комбинация полуметалла HgTe и полупроводника CdTe с практически одинаковыми решеточными параметрами в сверхрешетке HgTe–CdTe, предложенная в [1] в качестве нового материала для ИК-оптоэлектронных приборов, вызывает интерес к новому материалу из-за уникальных свойств, предсказываемых теорией и частично реализованных в сверхрешетках, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией [2]. Ясно, что реализация уникальных свойств возможна при условии хорошего структурного качества сверхрешетки без значительной катионной взаимодиффузии между слоями, чего для системы HgTe–CdTe нелегко достичь даже при низкотемпературном (170–190 °C) выращивании методом молекулярно-лучевой эпитаксии из-за высокого давления паров Hg. Для управления технологией выращивания сверхрешеток необходимы методы оценки структурного качества сверхрешетки с целью получения информации о реальном составе и толщине слоев в сверхрешетке, о наличии переходной области между слоями. Длинноволновая ИК-спектроскопия, как показано в работах [3,4], может дать такую структурную информацию, усредненную по всей сверхрешетке благодаря большой глубине проникновения длинноволнового ИК-излучения. Для анализа спектров длинноволнового ИК-отражения сверхрешеток HgTe–CdTe использовалась длинноволновая диэлектрическая функция сверхрешетки $\hat{\epsilon}_{SL}(\omega)$ в виде, предложенном в [5], для случая нормального падения

$$\hat{\epsilon}_{SL}(\omega) = \sum_i d_i \hat{\epsilon}_i(\omega) / \sum_i d_i, \quad (1)$$

где $\hat{\epsilon}_i(\omega)$ и d_i — диэлектрическая функция и толщина слоя i в пределах периода сверхрешетки $D = \sum d_i$. Выражение (1) справедливо, если выполняются требования пространственной однородности в каждом слое

[5], т.е. когда длина волны и глубина скин-слоя велики по сравнению с d_i . Для длинноволнового ИК-излучения эти требования выполняются. Авторы [3,4] показали, что учет в фоновой части диэлектрической функции сверхрешетки только двух лорентцовых решеточных осцилляторов с $\omega_{TO} = 118$ и 146 см^{-1} , соответствующих колебательным модам бинарных соединений HgTe и CdTe, недостаточен для интерпретации спектров решеточного отражения. Поэтому исследованные сверхрешетки HgTe-CdTe не могут быть представлены идеальной моделью чередующихся слоев HgTe и CdTe; взаимодиффузия атомов Hg и Cd между слоями в процессе роста приводит к более сложной структуре сверхрешетки.

В настоящей работе представлена более полная интерпретация спектров решеточного отражения сверхрешеток HgTe-CdTe из [3,4], основанная на свойствах объемных решеточных мод Hg-Te и Cd-Te колебаний в сплавах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, исследованных нами в [6]. Проведенный анализ спектров решеточного отражения сверхрешеток позволил представить модельные композиционные структуры сверхрешеток.

Недавно нами было показано [6], что спектр решеточных колебаний сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ любого состава характеризуется четырьмя модами Hg-Te колебаний и четырьмя модами Cd-Te колебаний с частотами, не зависящими от состава сплава. Составом сплава определяются их силы осцилляторов с соответствующим преобладанием в спектре тех или иных мод. На рис. 1 представлены спектр решеточного отражения сверхрешетки SL3P при температуре 6 К из [3] точки и спектр отражения подложки $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ при $T = 20 \text{ К}$ (штрихпунктир). Штрихами показаны частоты четырех мод Hg-Te колебаний ω_n^H ($n = 4, 3, 2, 1$) для сплава HgCdTe [6]. Видно, что спектр отражения сверхрешетки SL3P в окрестности частоты колебаний бинарного соединения HgTe ($\omega_{TO} = 118 \text{ см}^{-1}$) характеризуется сильной структурой и особенности этой структуры проявляются на частотах, совпадающих с частотами решеточных мод Hg-Te колебаний в сплавах $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$. Аналогичные особенности тонкой структуры наблюдаются в спектрах решеточного отражения сверхрешеток SL1P и ВМССТ1 [3,4]. Такое совпадение не является характерным для отражательной ИК-спектроскопии объемных кристаллов, и требуется отдельное рассмотрение этого вопроса.

Для системы, состоящей из полубесконечной подложки (с диэлектрической функцией $\hat{\epsilon}_3$) и поверхностного слоя или пленки (с диэлектрической функцией $\hat{\epsilon}_2$) толщиной L , амплитудный коэффициент отражения \hat{r}_{123} для нормального падения имеет вид [7]

$$\hat{r}_{123} = \frac{\hat{r}_{12} + \hat{r}_{23} \exp(i2\hat{\beta})}{1 + \hat{r}_{12}\hat{r}_{23} \exp(i2\hat{\beta})}, \quad (2)$$

$$\hat{r}_{12} = \frac{1 - \hat{n}_2}{1 + \hat{n}_2}, \quad \hat{r}_{23} = \frac{\hat{n}_2 - \hat{n}_3}{\hat{n}_2 + \hat{n}_3},$$

$\hat{n}_2 = \sqrt{\hat{\epsilon}_2}$, $\hat{n}_3 = \sqrt{\hat{\epsilon}_3}$ — коэффициенты Френеля; $\hat{\beta} = (2\pi\sqrt{\hat{\epsilon}_2}L)/\lambda$ — фазовый множитель; λ — длина волны. Коэффициент отражения

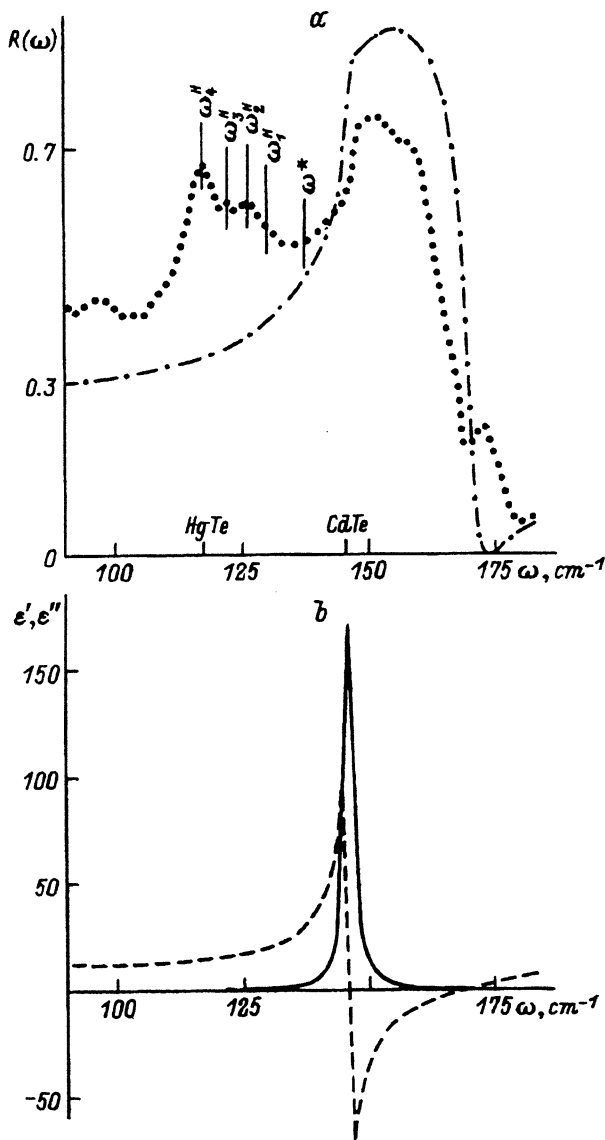


Рис. 1. а) Экспериментальный спектр решеточного отражения $R(\omega)$ сверхрешетки HgTe-CdTe SL3P [3] на подложке $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ при $T = 6 \text{ K}$ (точки) и спектр решеточного отражения подложки $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ при $T = 20 \text{ K}$ (штрихпунктир). Штрихами показаны частоты мод Hg-Te колебаний ω_n^H ($n = 4, 3, 2, 1$) и $\omega^* = 136 \text{ cm}^{-1}$ для объемного сплава $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ [6].
 б) Диэлектрическая функция $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$ подложки $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ при $T = 20 \text{ K}$.

$R(\omega) = |\hat{r}_{123}|^2$. В [8] было показано, что при условии

$$|\hat{\beta}| = \left| \frac{\omega}{c} \sqrt{\hat{\epsilon}_2} L \right| \ll 1 \quad (3)$$

выражение (2) приводится к очень простому виду

$$R(\omega) = |\hat{r}_{123}|^2 = \left| \frac{1 - (\sqrt{\hat{\epsilon}_3} - i \frac{\omega}{c} \Delta \hat{\epsilon} L)}{1 + (\sqrt{\hat{\epsilon}_3} - i \frac{\omega}{c} \Delta \hat{\epsilon} L)} \right|^2, \quad (4)$$

где $\Delta \hat{\epsilon} = (\hat{\epsilon}_2 - \hat{\epsilon}_3)$ — разность диэлектрических функций пленки и подложки. Уравнение (4) имеет вид уравнения Френеля для отражения от полубесконечного кристалла с эффективной диэлектрической функцией

$$\hat{\epsilon}_{\text{ef}}(\omega) = \left(\sqrt{\hat{\epsilon}_3} - i \frac{\omega}{c} \Delta \hat{\epsilon} L \right)^2.$$

Если ограничиться спектральной областью, в которой для диэлектрической функции подложки ее мнимая часть $\epsilon_3'' = 0$, то выражение (4) приводится к виду

$$\Delta R = R_{123} - R_{13} \approx \left| \frac{2(n_3 - 1)}{(n_3 + 1)^2} \frac{\omega}{c} \right| L \epsilon_2'', \quad (5)$$

где R_{13} — коэффициент отражения от подложки.

В области прозрачности подложки, где $\epsilon_3'' = 0$, коэффициент отражения $R_{123}(\omega)$ структуры пленка/подложка относительно коэффициента отражения подложки $R_{13}(\omega)$ воспроизводит дисперсию мнимой части $\epsilon_2''(\omega)$ диэлектрической функции пленки, если ее толщина L удовлетворяет условию (3). Особенности тонкой структуры спектров решеточного отражения сверхрешетки SL3P (рис. 1) и сверхрешеток SL1P и ВМССТ1 [3,4] проявляются на частотах объемных решеточных мод Hg-Te колебаний ω_n^H сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, и это в соответствии с (5) указывает на то, что диэлектрическая функция сверхрешетки $\hat{\epsilon}_{\text{SL}}(\omega)$ в области прозрачности подложки будет определяться этими модами ω_n^H ($n = 4, 3, 2, 1$) Hg-Te колебаний.

Спектр отражения $R(\omega) = |\hat{r}_{123}(\omega)|^2$ структуры сверхрешетка/подложка рассчитывался стандартным образом через выражение (2), где диэлектрическая функция сверхрешетки $\hat{\epsilon}_{\text{SL}}(\omega) = \hat{\epsilon}_2(\omega)$ представлялась в классической форме через параметры гармонических осцилляторов объемных решеточных мод Hg-Te и Cd-Te колебаний сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ с частотами $\omega_{ij} = \omega_n^H$ и ω_n^C ($n = 4, 3, 2, 1, 0$) [6]

$$\epsilon_{\text{SL}}(\omega) = \hat{\epsilon}_\infty + \sum_j \frac{S_j \omega_{ij}^2}{\omega_{ij}^2 - \omega^2 - i\omega \Gamma_j} + \hat{\epsilon}_{\text{int}}(\omega), \quad (6)$$

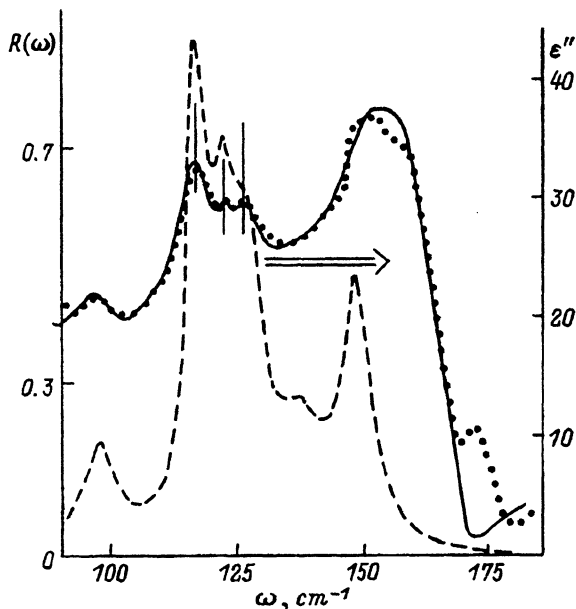


Рис. 2. Экспериментальный (точки) спектр решеточного отражения сверхрешетки SL3P на подложке CdZnTe и рассчитанный спектр (сплошная линия) с использованием диэлектрической функции сверхрешетки $\hat{\epsilon}_{SL}(\omega)$. Мнимая часть $\epsilon''_{SL}(\omega)$ изображена штриховой линией.

$\hat{\epsilon}_{int}(\omega)$ в (6) учитывает вклад межзонных переходов в бесщелевом HgTe [9]. При расчете $R(\omega)$ в $\epsilon_{SL}(\omega)$ варьировались в основном силы осцилляторов S_j и параметры затухания Γ_j .

Результаты модельного расчета коэффициента отражения $R(\omega)$ для сверхрешетки SL3P показаны на рис. 2 вместе с экспериментальным спектром (точки). Наблюдается превосходное их совмещение. Там же изображена штриховой линией диэлектрическая функция сверхрешетки $\epsilon''_{SL}(\omega)$, которая использовалась для расчета $R(\omega)$ сверхрешетки. Параметры решеточных осцилляторов для модельной диэлектрической функции $\hat{\epsilon}_{SL}(\omega)$ представлены в таблице. Cd-Te колебания в структуре сверхрешетка/подложка представлены одной модой $\omega_0^C = 146.5 \text{ cm}^{-1}$. Другие моды Cd-Te колебаний плохо разрешаются, поскольку эта область спектра совпадает с областью сильной дисперсии диэлектрической функции подложки CdZnTe, вклад которой в $R(\omega)$ является доминирующим в области Cd-Te колебаний. Из рис. 2 видно, что особенности коэффициента отражения $R(\omega)$ и диэлектрической функции $\epsilon''_{SL}(\omega)$ в области прозрачности подложки проявляются

Параметры решеточных осцилляторов для модельной диэлектрической функции $\hat{\epsilon}_{SL}(\omega)$

$\omega_{ij}, \text{cm}^{-1}$	S_j	Γ_j, cm^{-1}
98	0.7	8.0
118	1.0	3.5
122	0.7	5.0
126	1.1	7.0
136	0.6	11.0

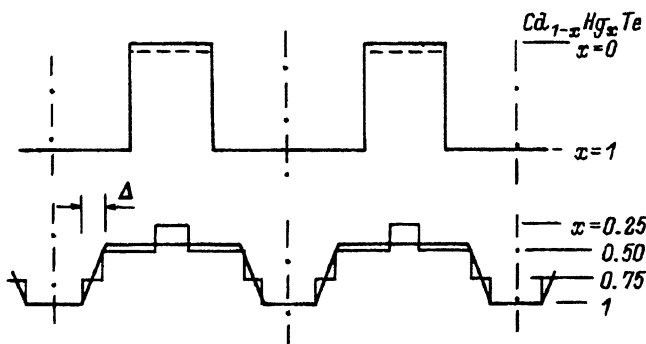


Рис. 3. Задаваемый композиционный профиль для сверхрешетки HgTe–CdTe SL3P и реальный профиль, рассчитанный из анализа спектра решеточного отражения.

на одних и тех же частотах $\omega_4^H = 118$, $\omega_3^H = 122$, $\omega_2^H = 126 \text{ см}^{-1}$, соответствующих модам Hg–Te колебаний в сплаве $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ [6] для базисных ячеек сплава $\text{Hg}(n)\text{Cd}(4-n)\text{Te}$ ($n = 4, 3, 2$), образованных тетраэдрически расположенными катионами вокруг аниона Te. Они являются преобладающими структурными элементами в HgTe и сплавах $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ и $\text{Hg}_{0.50}\text{Cd}_{0.50}\text{Te}$ соответственно. Если учесть соотношение сил осцилляторов этих мод 1.0 : 0.7 : 1.1, то есть основания считать, что реальная сверхрешетка SL3P не может быть представлена чередующимися слоями бинарных соединений HgTe и CdTe. Ясно, что изменения в сверхрешетке вызваны сильной взаимодиффузией Hg и Cd в процессе эпитаксиального роста.

Для моделирования композиционного профиля сверхрешетки представим ее диэлектрическую функцию в виде [5]

$$\hat{\epsilon}_{\text{SL}}(\omega) = \frac{\sum_{n=0}^4 d_n \hat{\epsilon}_n(\omega)}{\sum_{n=0}^4 d_n}, \quad (7)$$

где $\hat{\epsilon}_n(\omega)$ и d_n — диэлектрическая функция и толщина слоя n (в пределах периода сверхрешетки), образованного сплавом с преобладающим структурным элементом $\text{Hg}(n)\text{Cd}(4-n)\text{Te}$ ($n = 0, 1, 2, 3, 4$) и характеризующего модой Hg–Te колебаний ω_n^H . Тогда из соотношения сил осцилляторов S_n^H решеточных мод ω_n^H Hg–Te колебаний для сверхрешетки SL3P (см. таблицу) и объемных кристаллов HgTe, $\text{Hg}_{0.71}\text{Cd}_{0.29}\text{Te}$ и $\text{Hg}_{0.52}\text{Cd}_{0.48}\text{Te}$ [6] можно оценить толщины соответствующих n -слоев: слоя HgTe $d_4 = 23 \text{ \AA}$, слоя $\text{Hg}_{0.75}\text{Cd}_{0.25}\text{Te}$ $d_3 = 16 \text{ \AA}$, слоя $\text{Hg}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$ $d_2 = 52 \text{ \AA}$. Композиционный профиль сверхрешетки SL3P, полученный из анализа спектра решеточного отражения, показан на рис. 3. Этот профиль соответствует сверхрешетке HgTe/ $\text{Hg}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$ с переходной областью между слоями из сплава $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x > 0.5$) переменного состава толщиной $\Delta = 10 \text{ \AA}$.

Подобный анализ спектра ИК-отражения был проведен для сверхрешетки SL1P [4], параметры которой близки сверхрешетке SL3P. Рассчитанный композиционный профиль сверхрешетки SL1P в общих чертах подобен профилю сверхрешетки SL3P.

Более совершенный композиционный профиль найден для структуры ВМССТ1 [3,4]. Эта сверхрешетка состоит из чередующихся слоев HgTe и Cd_{0.91}Hg_{0.09}Te. Отсутствие в спектре решеточного отражения решеточных мод ω_3^H и ω_2^H Hg-Te колебаний для базисных ячеек Hg(3)Cd(1)Te и Hg(2)Cd(2)Te соответственно указывает на наличие в сверхрешетке только слоев HgTe при практическом отсутствии переходных областей переменного состава между слоями HgTe и Cd_{0.91}Hg_{0.09}Te.

Во всех рассмотренных спектрах решеточного отражения сверхрешеток SL3P, SL1P и ВМССТ1 наблюдается мода 136 см⁻¹, причем с наибольшей силой осциллятора (0.6–0.7) в SL3P и SL1P с широкой переходной областью между слоями. Эта решеточная мода наблюдается в спектрах ИК-отражения объемных кристаллов Hg_xCd_{1-x}Te в широком интервале составов 0.1 < x < 0.9 [6], но с силой осциллятора около 0.25. Природа моды 136 см⁻¹ не установлена.

Рассмотренный метод анализа спектров решеточного отражения сверхрешеток HgTe–CdTe может оказаться очень эффективным для управления процессом IMP (interdiffused multilayer process) [10]. Выраженная структура из чередующихся слоев HgTe и CdTe с соответствующими толщинами подвергается термообработке для инициирования взаимодиффузии Hg и Cd с целью получения композиционно однородных пленок сплава Hg_xCd_{1-x}Te [10] или квантоворазмерных структур на основе сплавов HgCdTe с соответствующим диффузионным профилем между слоями [11].

Список литературы

- [1] Schulman J.N., McGill T.C. // Appl. Phys. Lett. 1979. V. 34. P. 663.
- [2] Faurie J.P., Sivananthan S., Rino J. // J. Vac. Sci. Technol. A. 1986. V. 4. P. 2096–3000.
- [3] Perkowitz S., Rajavel D., Sow I.K., Reno J., Faurie J.P., Jones C., Casselman T.N., Harris K.A., Cook J.W., Schetzina J.F. // Appl. Phys. Lett. 1986. V. 49. P. 806–808.
- [4] Perkowitz S., Sudharsanan R., Yom S. // J. Vac. Sci. Technol. A. 1987. V. 5. P. 3157–3160.
- [5] Agranovich V.M., Kravtsov V.E. // Sol. St. Commun. 1985. V. 55. P. 85–89.
- [6] Козырев С.П., Пыркв В.Н., Водопьянов Л.К. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 8. С. 2372–2381; № 12. С. 3695–3704.
- [7] Heavens O.S. Optical Properties of Thin Solid Films. Dover, N.Y., 1965.
- [8] Vodopyanov L.K., Kozyrev S.P. // Phys. Stat. Sol. (a). 1982. V. 72. P. 737–744.
- [9] Grynberg M., Toullec R.Le., Balkanski M. // Phys. Rev. B. 1974. V. 9. P. 517–526.
- [10] Irvine S.J.C., Tunncliffe J., Mullin J.B. // Mater. Lett. 1984. V. 2. P. 305–307.
- [11] Lussan A., Druilhe R., Marfaing Y., Rzepka E. // Semicond. Sci. Techn. 1993. V. 8. P. S197–S199.

Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН
Москва

Поступило в Редакцию
5 октября 1993 г.
В окончательной редакции
23 марта 1994 г.