

Расчет уровней размерного квантования в напряженных ZnCdSe/ZnSe квантовых ямах

© М.В. Максимов, И.Л. Крестников, С.В. Иванов, Н.Н. Леденцов, С.В. Сорокин

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 16 декабря 1996 г. Принята к печати 25 декабря 1996 г.)

На основе литературных данных произведена подгонка параметров ZnSe и CdSe для расчета уровней в квантовых ямах ZnCdSe/ZnSe. Показана адекватность модели на примере структур с набором квантовых ям, толщина и состав которых определялись независимыми способами.

1. Введение

В последнее время большое внимание привлечено к созданию полупроводниковых лазеров, работающих в сине-зеленом оптическом диапазоне, на основе соединений $A^{II}B^{VI}$. Так как активной областью в этих приборах является квантовая яма (КЯ) ZnCdSe или набор КЯ в ZnSe матрице, представляет интерес расчет энергий оптических межзонных переходов. В системе GaAs/AlGaAs подобная задача уже давно решена, и ее решение используется, в частности, для определения толщины КЯ по энергии перехода. Однако система GaCdSe/ZnSe изучена в существенно меньшей степени, что говорит о необходимости дальнейших исследований.

В этой работе обобщены литературные данные энергий оптических переходов, и на их основе определены некоторые физические параметры ZnSe и CdSe, необходимые для расчетов. Также нами были выращены структуры с набором КЯ ZnCdSe, в которых были определены толщины КЯ и их состав методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и по ростовым калибровкам соответственно. Расчет энергий переходов на основе определенных по литературным данным параметров дал хорошее соответствие с экспериментом, что говорит об адекватности нашей модели.

2. Экспериментальная часть

Эпитаксиальные структуры выращивались на установке молекулярно-пучковой эпитаксии (ЭП-1203) на подложках GaAs с ориентацией (100) [1]. В качестве источников молекулярных пучков использовались элементарные Zn(6N), Se(6N), Cd(6N). Для исследования фотолюминесценции (ФЛ) использовался криостат, в котором образец находился в потоке газообразного гелия при температуре 80 К. В качестве источника возбуждения использовалась галогенная лампа, свет от которой пропусклся через монохроматор. В качестве регистрирующей системы использовался монохроматор МДР-23 и охлаждаемый фотоумножитель, работающий в режиме счета фотонов.

3. Расчетная модель

В отличие от уже упоминавшейся системы GaAs/AlGaAs параметр решетки ZnSe не совпадает с параметром решетки CdSe, вследствие чего структура с КЯ ZnCdSe в матрице ZnSe является напряженной. Упругие напряжения приводят к изменению ширины запрещенной зоны деформированного материала, а следовательно, и к изменению потенциального барьера в КЯ. В случае псевдоморфного роста, т.е. в случае, когда параметр решетки КЯ "наследуется" от матрицы, деформацию можно представить в виде суперпозиции гидростатической деформации и деформации сдвига [2]. Гидростатическое напряжение, обусловленное гидростатической деформацией, приводит к изменению разницы центров тяжести валентной зоны и зоны проводимости на энергию:

$$\Delta E^{hy} = 2a \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \left(\frac{a_0^b}{a_0} - 1 \right), \quad (1)$$

где a_0 и a_0^b — параметры решеток ненапряженного материала ямы и матрицы, C_{11} и C_{12} — коэффициенты упругости материала ямы, a — гидростатический деформационный потенциал для запрещенной зоны. В отличие от гидростатического напряжения напряжение сдвига действует только на валентную зону, при этом изменение энергетического положения зон тяжелых и легких дырок различно, вследствие различия их симметричных свойств. Этот эффект приводит к дополнительному расщеплению уровней тяжелой и легкой дырок по сравнению с эффектом размерного квантования. Для некоторых составов ZnCdSe возможна ситуация, когда край зоны легкой дырки в КЯ лежит ниже по энергии, чем в барьере, т.е. для легкой дырки осуществляется случай КЯ II рода. В этом случае нет локализирующего потенциала для легкой дырки и переходы осуществляются с электронных уровней в состоянии барьера. Изменения энергетического положения зон тяжелой (ΔE_h^{sh}) и легкой (ΔE_l^{sh}) дырок относительно вырожденного положения определяются

$$\Delta E_h^{sh} = \delta E^{sh}, \quad (2)$$

$$\Delta E_l^{sh} = \frac{1}{2} \left[\Delta_0 - \frac{1}{2} \delta E^{sh} - \sqrt{(\Delta_0 + \delta E^{sh})^2 + 8(\delta E^{sh})^2} \right], \quad (3)$$

где Δ_0 — спин-орбитальное расщепление, а

$$\delta E^{sh} = -b \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \left(\frac{a^b}{a_0} - 1 \right), \quad (4)$$

b — сдвиговый деформационный потенциал. Тогда эффективная ширина запрещенной зоны в яме для тяжелой ($E_{g,w}^{eff,h}$) и легкой ($E_{g,w}^{eff,l}$) дырок и разрыва зон

$$E_{g,w}^{eff,h(l)} = E_{g,w} + \Delta E^{hy} + \Delta E_{h(l)}^{sh}, \quad (5)$$

$$U_e = (1 - Q)(E_{g,b} - E_{g,w}^{eff,h}), \quad (6)$$

$$U_h = Q(E_{g,b} - E_{g,w}^{eff,h}), \quad (7)$$

$$U_l = E_{g,b} - E_{g,w}^{eff,l} - U_e, \quad (8)$$

где $E_{g,b}$ и $E_{g,w}$ — ширины запрещенных зон ненапряженных материалов барьера и КЯ соответственно, Q — относительный разрыв валентной зоны для тяжелой дырки. Для U_l возможны отрицательные значения, что соответствует КЯ II типа. Параметры для твердого раствора в $Zn_{1-x}Cd_xSe$ -яме состава x определяются по квадратичной аппроксимации для E_g и по линейной для всех остальных параметров (B — коэффициент квадратичной нелинейности):

$$E_{g,w} = x \cdot E_{g,CdSe} + (1 - x) \cdot E_{g,ZnSe} - x(1 - x)B, \quad (9)$$

$$par = x \cdot par_{CdSe} + (1 - x)par_{ZnSe}, \quad (10)$$

где par — любой параметр, кроме E_g .

Уровни энергии (ε) в потенциальных ямах определяются из следующего трансцендентного уравнения

$$\pm \left(\sqrt{\frac{m_w}{m_b} (U - \varepsilon)} \right)^{\pm 1} = \text{tg} \left(\sqrt{\frac{m_w \varepsilon L}{2 \hbar}} \right), \quad (11)$$

где знак плюс соответствует нечетным уровням, а минус — четным; m_b и m_w — эффективные массы частиц в барьере и КЯ соответственно (нами не учитывалась пространственная анизотропия масс), U — высота потенциального барьера, L — толщина КЯ. Тогда энергия оптического перехода

$$\hbar\omega = E_{g,w}^{eff} + \varepsilon_e + \varepsilon_{h(l)} - E_x, \quad (12)$$

где E_x — энергия связи экситона. В случае КЯ II типа для легкой дырки говорить об уровне размерного квантования становится бессмысленным, и так как переходы осуществляются в состоянии барьера, то $\varepsilon_l = 0$. В предлагаемой модели мы не учитывали изменение энергии связи экситона с изменением состава и толщины КЯ (E_x может меняться от 21 мэВ для объемного материала до ~ 40 мэВ для КЯ толщиной менее 50 Å [4]). Однако для экситонов с участием тяжелой и легкой дырок мы использовали разные значения энергии связи: для

”тяжелого” экситона $E_x = 30$ мэВ, а для ”легкого” меньшее значение ($E_x = 20$ мэВ) из-за меньшей приведенной массы, а также из-за того, что для легких дырок может осуществляться II тип КЯ, что также приводит к уменьшению энергии связи экситона.

4. Результаты и их обсуждение

Для использования описанной в предыдущем разделе модели в расчетах необходимо знать численные значения физических параметров ZnSe и CdSe, которые собраны в табл. 1. Некоторые из этих параметров известны с достаточной степенью достоверности, однако по другим литературные данные существенно расходятся. В связи с этим нами была предпринята попытка систематизировать имеющиеся в литературе данные по энергиям оптических переходов в КЯ ZnCdSe/ZnSe (в табл. 2 представлены данные по толщине и составу КЯ, взятые из литературы) и подобрать по этим данным параметры, при которых наблюдается наилучшее соответствие расчета с экспериментальными данными. Результаты процесса подгонки представлены в табл. 1 (варьирующиеся параметры выделены крупным шрифтом). При этом среднее рассогласование расчета с экспериментом составляет ~ 15 мэВ (см. табл. 2), а в некоторых случаях достигает 70 мэВ. Столь большое несоответствие может быть обусловлено тем, что ошибка в определении

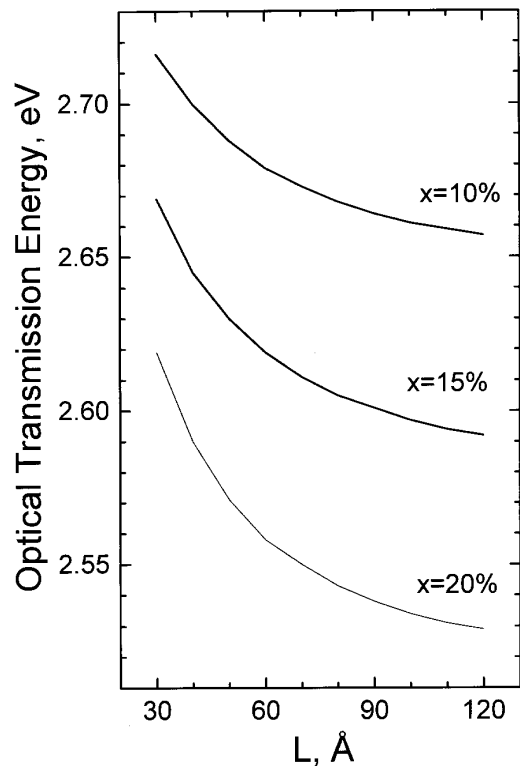


Рис. 1. Зависимости расчетных энергий оптических переходов с участием тяжелых дырок от толщины квантовой ямы для различных составов.

Таблица 1. Физические параметры ZnSe и CdSe, используемые при расчетах

Параметры	Литература		Расчет	
	ZnSe	CdSe ^a	ZnSe	CdSe ^a
$a_0, \text{Å}$	5.65 [2], 5.6676 [3,4]	6.077 [3], 6.052 [4]	5.6676	6.077
$E_g, \text{эВ}$	2.83 ^b [2], 2.82 ^b [3,5,6,7]	1.9 ^b [4], 1.77 ^b [5], 1.765 ^b [3,6], 1.8 ^b [7]	2.81 ^c	1.79 ^{c,d}
$\Delta_0, \text{эВ}$	0.43 [2]	0.42 [2]	0.43	0.42
$C_{11}, 10^{10} \text{ Н/м}^2$	8.26 [2,3,5,6], 8.59 [4]	7.49 [5], 6.67 [3,4,6]	8.26	6.67
$C_{12}, 10^{10} \text{ Н/м}^2$	4.98 [2,3,5,6], 5.06 [4]	4.61 [5], 4.63 [3,4,6]	4.98	4.63
$a, \text{эВ}$	-5.82 [2,5], -5.4 [4], -4.25 [6]	-3.45 [4], -3.664 [6]	-4.7 ^d	-2.6 ^d
$b, \text{эВ}$	-1.2 [2,3,4,5,6]	-1.1 [5], -0.8 [3,4,6]	-1.2	-0.8
m_{el}/m_0	0.16 [3,5,6], 0.14 [4]	0.13 [3,5,6], 0.11 [4]	0.16	0.13
m_{hh}/m_0	0.6 [3,6], 1.4 [5], 0.49 [4]	1.23 [5], 0.45 [3,4,6]	0.6	0.45
m_{lh}/m_0	0.145 [3,4], 0.15 [5]	0.145 [4]	0.15	0.145
$B, \text{эВ}$	0.35 [4], 0.75 [5], 0.26 [5], 0.51 [7]		0.45 ^d	
Q	0.25 [4]		0.20 ^d	

Примечание. ^a Для кубической модификации. ^b Для 5 К. ^c Для 77 К. ^d Параметр использовался в качестве подгоночного.

Таблица 2. Литературные данные и расчет энергий оптических переходов в квантовых ямах Zn_{1-x}Cd_xSe

№ п.п.	$L, \text{Å}$	$x, \%$	$e1 - hh1, \text{эВ}$			$e1 - hl1, \text{эВ}$			Ссылки
			эксперимент	расчет	расчет для другого состава	эксперимент	расчет	расчет для другого состава	
1	28	10	2.703	2.721					[8]
2	30	10	2.747	2.717	2.747	2.766	2.740	2.766	[9]
3	30	26	2.580	2.560	2.585	2.646	2.614	2.636	[9]
4	60	14	2.650	2.631	2.653				[6]
5	90	14	2.639	2.613	2.636				[6]
6	120	14	2.629	2.606	2.628				[6]
7	30	11	2.718	2.708	2.718	2.737	2.733	2.743	[3]
8	30	16	2.685	2.660	2.687	2.720	2.695	2.718	[3]
9	70	11	2.658	2.660	2.655	2.685	2.695	2.693	[3]
10	30	23	2.580	2.590	2.582	2.640	2.6382	.633	[3]
11	200	11	2.670	2.636	2.665	2.692	2.675	2.701	[3]
12	70	11	2.640	2.660	2.46	2.695	2.695	2.685	[7]
13	70	14	2.627	2.623	2.627	2.672	2.665	2.670	[7]
14	70	17	2.581	2.587	2.582	2.637	2.636	2.634	[7]
15	70	22	2.514	2.526	2.519	2.594	2.587	2.584	[7]
16	30	10	2.737	2.717	2.740	2.761	2.740	2.761	[4]
17	40	10	2.728	2.700	2.726	2.749	2.727	2.749	[4]
18	50	10	2.717	2.688	2.715	2.743	2.717	2.740	[4]
19	20	31	2.646	2.575	2.644	2.679	2.626	2.683	[4]
20	30	31	2.591	2.509	2.590	2.663	2.573	2.640	[4]
21	40	31	2.536	2.470	2.546	2.604	2.542	2.605	[4]
22	50	31	2.512	2.446	2.524	2.590	2.523	2.588	[4]

процентного содержания CdSe в КЯ может составлять 1–2 мол%, особенно для случая большого содержания CdSe. Как видно из рис. 1, даже небольшое изменение состава приводит к существенному изменению энергии перехода, в то время как зависимость энергии перехода от толщины КЯ не является столь сильной. В связи с

этим мы подобрали составы в КЯ, не меняя толщины, так, чтобы несоответствие расчета с экспериментом в каждом случае было минимальным (см. табл. 2, графа "Расчет для другого состава"). Изменение величины содержания CdSe не превышало 1.5 мол% во всех случаях, за исключением № 19–22, где нам пришлось

изменить состав на 7 мол%, что говорит о возможной систематической ошибке экспериментальных данных. В случае подобранных составов рассогласование составляет ~ 5 мэВ, что является вполне достаточной точностью.

Для проверки расчетной модели нами были выращены структура с набором КЯ, толщины которых относятся как 1:2:3:4:5 (структура А), и структура с набором КЯ одинаковой толщины, разделенных барьерами, толщина которых на 15% меньше толщины КЯ (структура В). На рис. 2 представлены фотографии этих структур, полученные методом ПЭМ. Из этих фотографий были определены толщины КЯ, которые составили $(24 \pm 2) : (48 \pm 2) : (72 \pm 2) : (96 \pm 2) : 120 \pm 2$ Å для структуры А и 70 ± 2 Å для структуры В. Содержание Cd определялось по ростовым калибровкам и равнялось в $22 \pm 2\%$ случае структуры А и $13 \pm 1\%$ случае структуры В. На рис. 3 представлены спектры люминесценции от структуры А и возбуждения люминесценции от структуры В, снятые при 77 К. Стрелками отмечены энергии переходов, рассчитанные для содержания CdSe 23% и толщин КЯ 24:48:72:96:120 Å (структуры А) и 13.5% и 70 Å (структура В) соответственно. Из рисунка видно, что наблюдается хорошее соответствие рассчитанных энергий переходов экспериментальным (большое несоответствие в случае узкой КЯ (24 Å) может быть объяснено увеличением энергии связи экситона, изменение которой с изменением толщины КЯ нами не учитывалось). Такое соответствие говорит о воз-

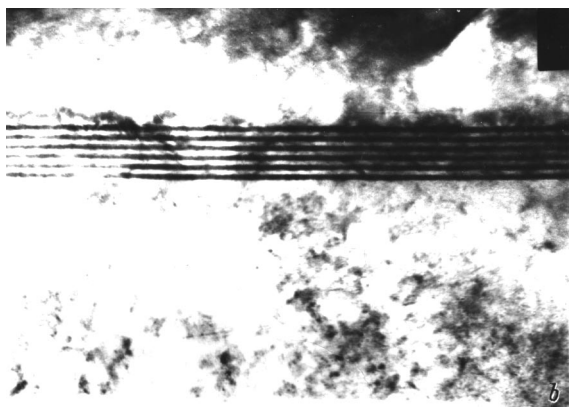
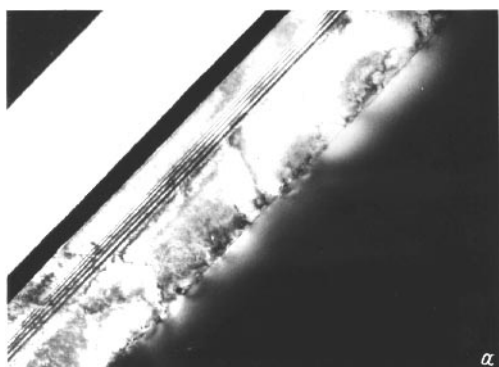


Рис. 2. Фотографии, полученные методом просвечивающей электронной микроскопии структур А (а) и В (б).

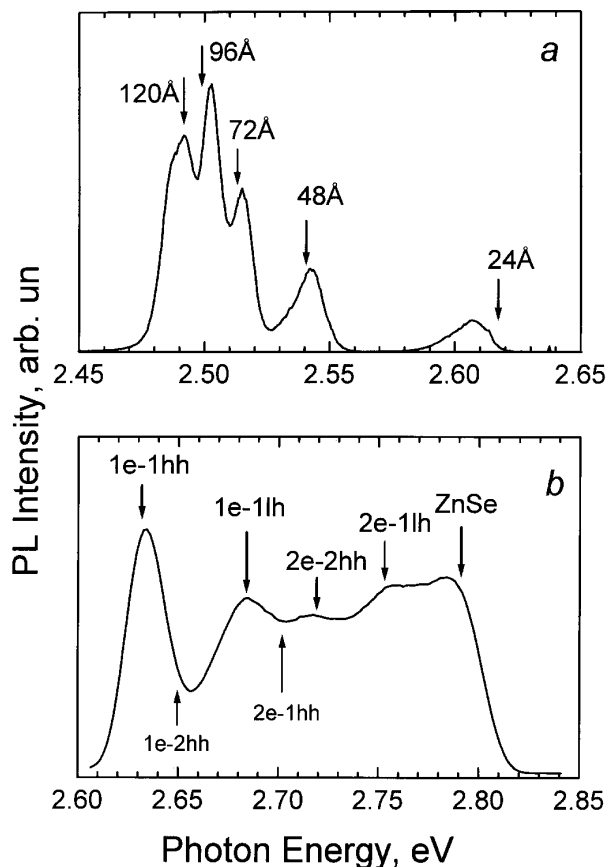


Рис. 3. Спектры фотолюминесценции от структуры А (а) и возбуждения фотолюминесценции от структуры В (б), снятые при 77 К. Стрелками отмечены энергии переходов, рассчитанные для содержания CdSe 23.8% и толщин КЯ 24:48:72:96:120 Å (структура А) и 13.8% и 70 Å (структура В) соответственно.

можности использования этой модели с параметрами из табл. 1 для расчетов. Однако точность определения параметра Q невысока, это связано с тем, что величина этого параметра слабо влияет на энергии переходов с участием первых уровней. Таким образом, дальнейшее совершенствование модели необходимо производить с учетом возбужденных состояний.

5. Заключение

Нами был произведен анализ литературных данных по энергиям оптических переходов в ZnCdSe/ZnSe КЯ, на основании которого были определены некоторые физические параметры ZnSe и CdSe, при которых наблюдается наилучшее совпадение значений, даваемых расчетной моделью, с экспериментом. Также модель была проверена на выращенных нами структурах с набором КЯ, толщины и состав которых были определены независимыми способами.

Авторы выражают признательность Н.А. Берту за данные ПЭМ.

Работа была поддержана грантами INTAS-94-481 и РФФИ № 95-02-04056.

Список литературы

- [1] S.V. Ivanov, S.V. Sorokin, P.S. Pop'ev, J.R. Kim, H.D. Jung, H.S. Park. *J. Cryst. Growth*, **159**, (1996).
- [2] Chris G Van de Walle. *Phys. Rev. B*, **39**, 1871 (1989).
- [3] R. Chingolani, P. Prete, D. Greco, P.V. Guigno, M. Lomascolo, R. Rimaldi, L. Calcagnile, L. Vanzetti, L. Sobra, A. Franciosi. *Phys. Rev. B*, **51**, 5176 (1995).
- [4] V. Pellegrini, R. Atamasov, A. Tredicucci, F. Beltram, C. Amzulini, L. Sobra, L. Vanzetti, A. Francioso. *Phys. Rev. B*, **51**, 5171 (1995).
- [5] Y. Wu, K. Ichino, Y. Kawakami, S. Fujita. *Jpn. J. Appl. Phys.* **31**, 1737 (1992).
- [6] H.J. Lozykowski, V.K. Shastri. *J. Appl. Phys.* **69**, 3235 (1991).
- [7] F. Liaci, P. Bigenwald, O. Briot, B. Gil, N. Briot, T. Cloitre, R.L. Aulombard. *Phys. Rev. B*, **51**, 4699 (1995).
- [8] R. Chingolani, R. Rimaldi, L. Calcagnile, P. Prete, P. Sciacovelli, L. Tapfer, L. Vanzetti, G. Mula, F. Bassani, L. Sobra, A. Franciosi. *Phys. Rev. B*, **49**, 16 769 (1994).
- [9] R. Chingolani, M. Di Duo, M. Lomascolo, R. Rimaldi, P. Prete, L. Vasanelli, L. Vanzetti, F. Bonanni, L. Sobra, A. Franciosi. *Phys. Rev. B*, **50**, 12 179 (1994).

Редактор В.В. Чалдышев

Level calculations in strained ZnCdSe/ZnSe quantum wells

M.V. Maximov, I.L. Krestnikov, S.V. Ivanov,
N.N. Ledentsov, S.V. Sorokin

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia