

# ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИОННЫХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК ZnSe НА GaAs(100)

*A.B.Коваленко, A.Ю.Мекекечко*

В гетероэпитаксиальной структуре  $\text{AnSe}/\text{GaAs}(100)$  упругая деформация вызывается как рассогласованием параметров решетки слоя и подложки ( $a_{0\text{ZnSe}} = 5.6684 \text{ \AA} > a_{0\text{GaAs}} = 5.6533 \text{ \AA}$ ), так и отличием коэффициентов термического расширения материалов ( $\alpha_{\text{ZnSe}} = 6.84 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1} > \alpha_{\text{GaAs}} = 5.8 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ). Если толщина эпитаксиального слоя  $\text{ZnSe}$   $d \sim 0.88 \text{ мкм}$ , то параметр решетки пленки соизмерим с объемным кристаллом [1]. В этом случае деформационные напряжения отсутствуют, а валентная зона характеризуется вырожденным состоянием  $\Gamma_8$ . Если  $d < 0.15 \text{ мкм}$ , то имеет место когерентный рост, при котором  $a_{\perp\text{ZnSe}} > a_{0\text{ZnSe}}$ . Двумерное напряжение, вызванное решеточным рассогласованием, обусловливает тетрагональное искривление решетки  $\text{ZnSe}$  и расщепляет мультиплет  $P_{3/2}$  на зону тяжелых  $hh - V_1$  ( $J = 3/2$ ,  $m_j = \pm 3/2$ ) и легких  $Lh - V_2$  ( $J = 3/2$ ,  $m_j = \pm 1/2$ ) дырок с положительным сдвигом центра тяжести мультиплета, относительно зоны проводимости. Величина расщепления валентной зоны обозначена как  $2\Delta_e$ . В интервале толщин 0.15–0.88 мкм отмечаются резкое снижение  $a_{\perp\text{ZnSe}}$ , уменьшение значения компоненты тензора деформации ( $e$ ) и возникновение дислокаций несоответствия. При  $d > 0.88 \text{ мкм}$  возникает деформация растяжения, обусловленная различием коэффициентов термического расширения, сдвигающая валентные зоны к зоне проводимости. Для двумерной деформации, параллельной (100) и (010), кубический материал  $\text{ZnSe}$  является оптически одноосным, а компоненты тензора деформации при этом могут быть представлены в виде [2,3]

$$-e_{xx} = -e_{yy} = e, \quad (1)$$

$$e_{zz} = (2C_{12}/C_{11})e, \quad (2)$$

$$e_{xy} = e_{yz} = e_{zx} = 0, \quad (3)$$

где  $e$  — компонента тензора деформации положительна для напряжения сжатия и отрицательна для напряжения растяжения;  $C_{12}, C_{11}$  — коэффициент жесткости.

Сказанное означает, что в зависимости от толщины слоя  $\text{ZnSe}$  на  $\text{GaAs}(100)$  величины  $2\Delta_e$ ,  $e$  изменяются, что в свою очередь будет проявляться в изменении энергетического положения линий «тяжелых»  $E_{hh}$  и «легких»  $E_{Lh}$  экситонов в спектрах фотолюминесценции (ФЛ) и в спектрах отражения (СО). При установлении такой зависимости может быть решена обратная задача — по данным оптических измерений определить  $2\Delta_e$ ,  $e$  и толщину пленки  $d$ . В рамках используемого подхода для случая упругой деформации будем полагать, что энергии связи экситонов незначительно зависят от деформации и эффективных масс дырок вблизи  $\mathbf{k} = 0$ . Тогда ввиду допускаемой соизмеримости ридбергов  $R(Lh)$ ,  $R(hh)$

Оценка величин расщепления валентной зоны ( $2\Delta_e$ ), толщины слоев ZnSe ( $d_{\text{расч.}}$ ) на GaAs(100) по данным оптических измерений; расчет значений тензора деформации ( $\epsilon$ ) и толщин слоев, измеренных с помощью электронного микроскопа  $d_{\text{изм.}}$ .

| Энергия, эВ        | Спектральная характеристика | $2\Delta_e$ , мэВ | $\epsilon \cdot 10^{-3}$ | $d_{\text{расч.}}$ , мкм | $d_{\text{изм.}}$ , мкм |
|--------------------|-----------------------------|-------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|
| $E_{hh} = 2.80452$ | CO                          | 11.73             | 2.77                     | 0.006                    | 0.006                   |
| $E_{Lh} = 2.81625$ |                             |                   |                          |                          |                         |
| $E_{hh} = 2.80379$ | ФЛ                          | 1.73              | 0.3914                   | 0.510–0.515              | 0.52                    |
| $E_{Lh} = 2.80552$ |                             |                   |                          |                          |                         |
| $E_{hh} = 2.80315$ | ФЛ                          | 1.48              | 0.3486                   | 0.545–0.55               | 0.55                    |
| $E_{Lh} = 2.80463$ |                             |                   |                          |                          |                         |
| $E_{hh} = 2.8034$  | ФЛ                          | 1.5               | 0.3394                   | 0.535–0.54               | 0.540                   |
| $E_{Lh} = 2.8049$  |                             |                   |                          |                          |                         |
| $E_{hh} = 2.80351$ | CO                          | 1.5               | 0.3393                   | 0.535–0.54               |                         |
| $E_{Lh} = 2.8050$  |                             |                   |                          |                          |                         |
| $E_{hh} = 2.8030$  | ФЛ                          | 1.4               | 0.3258                   | 0.55                     | 0.56                    |
| $E_{Lh} = 2.80440$ |                             |                   |                          |                          |                         |
| $E_{hh} = 2.8030$  | CO                          | 1.41              | 0.319                    | 0.555–0.56               |                         |
| $E_{Lh} = 2.80441$ |                             |                   |                          |                          |                         |
| $E_{hh} = 2.80256$ | ФЛ                          | -1.28             | -0.286                   | 3.4–3.5                  | 3.5                     |
| $E_{Lh} = 1.80129$ |                             |                   |                          |                          |                         |
| $E_{hh} = 2.80237$ | CO                          | -1.27             | -0.287                   | 3.4–3.5                  |                         |
| $E_{Lh} = 2.8011$  |                             |                   |                          |                          |                         |
| $E_x = 2.8002$     | ФЛ, CO                      | 0                 | 0                        | 0.88                     | 0.88                    |

энергетическую разность  $E_{Lh} - E_{hh}$  можно рассматривать как эквивалент расщепления валентной зоны  $2\Delta_e$  [2]. Для двумерной деформации, параллельной (100) и (010) в кубическом ZnSe в первом приближении, линейные уравнения сдвига валентных зон могут быть представлены в виде [3]

$$\Delta E_0(1) = [-2a((C_{11} - C_{12})/C_{11}) + b((C_{11} + 2C_{12})/C_{11})] \epsilon, \quad (4)$$

$$\Delta E_0(2) = [-2a((C_{11} - C_{12})/C_{11}) - b((C_{11} + 2C_{12})/C_{11})] \epsilon, \quad (5)$$

где  $a$  — гидростатический деформационный потенциал;  $b$  — потенциал сдвига для тетрагональной симметрии;  $C_{11}, C_{12}$  — коэффициенты жесткости. Применение данных соотношений на практике затрудняет большой разброс в значениях коэффициентов жесткости, деформационных потенциалов и энергетического положения свободного экситона.

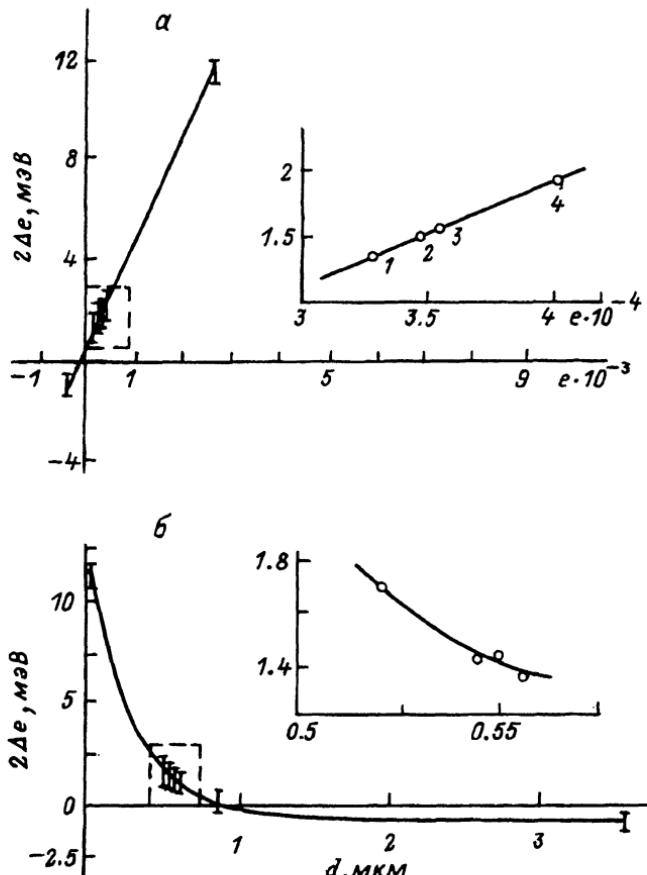
В качестве основного экспериментального параметра, учитывающего влияние деформационных процессов, выбрана величина  $2\Delta_e$ , которую можно оценить как

$$2\Delta_e = -2be(C_{11} + 2C_{12})/C_{11} = -Ae. \quad (6)$$

Для нахождения корректной величины  $A$  мы отталкивались от экспериментального параметра  $2\Delta_e$ , значение которого устанавливалось на

основе анализа СО и спектров ФЛ гетероструктур ZnSe/GaAs(100), выращенных методом фотостимулированной газофазовой эпитаксии. Энергетические положения экситонных термов определялись по максимумам излучения в спектрах ФЛ и уточнялись по данным СО [4]. Полученные результаты сведены в таблицу. На основе известных нам значений  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  и  $b$  был установлен диапазон изменения величины параметра  $A$ : 4.40367–5.73981. Для определения значения  $A$  проанализированы СО сверхтонких слоев ZnSe с  $d < 0.15$  мкм, для которых  $e = e_{\max} = 2.77 \cdot 10^{-3}$  [5]. Коррекция искомой величины дала значение  $A = 4.4197$  при использовании  $C_{11} = 8 \cdot 10^{10}$ ,  $C_{12} = 4.9 \cdot 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>,  $b = -1$  эВ [6–8]. Зная величину константы  $A$ , по формуле (3) можно определить компоненту тензора деформации  $e$ , а по известной зависимости  $e = f(d)$  для ZnSe/GaAs(100) [5] оценить  $d$ .

Наблюдается хорошая сходимость расчетных и экспериментальных значений  $d$ , полученных с помощью электронного микроскопа (см. таблицу). Рассчитанные функции  $2\Delta_e = f(e)$  и  $2\Delta_e = f(d)$  с соответствующими экспериментальными точками представлены на рисунке. Следует



Зависимость величины расщепления валентной зоны  $2\Delta_e$  в пленке ZnSe, выращенной на GaAs(100), от тензора деформации (a) и толщины пленки (б). На вставке a: 1 —  $d = 0.56$ , 2 — 0.55, 3 — 0.54, 4 — 0.52 мкм.

отметить хорошо проявившуюся линейную зависимость  $e\Delta_e = f(e)$ , проходящую через начало координат для пленки с  $d = 0.88$  мкм ( $e = 0$ ).

### Список литературы

- [1] Yao T., Matsui S., Ishida K. // J. Cryst. Growth. 1987. V. 81. P. 518–523.
- [2] Сейсян Р.П. Спектроскопия диамагнитных экситонов. М., 1984. 272 с.
- [3] Asai N., Oe K. // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. N. 4. P. 2052–2056.
- [4] Коваленко А.В., Мекекечко А.Ю., Бондарь Н.В. // ФТП. 1992. Т. 26. № 7. С. 1251–1255.
- [5] Petruzello J., Greenberg B.L., Cammack D.A. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. N 7. P. 2299–2303.
- [6] Mohammed K., Cammack D.A., Dalby R. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 50. N 1. P. 37–39.
- [7] Fujiyasu N., Mochizuki K. // J. Appl. Phys. 1985. V. 57. N 8. P. 2960–2962.
- [8] Kanda T., Suemine I., Yamada K. // J. Cryst. Growth. 1988. V. 93. P. 662–666.

Днепропетровский государственный университет

Поступило в Редакцию  
16 марта 1993 г.  
В окончательной редакции  
22 июня 1993 г.