

Колебательные спектры напряженных (001) сверхрешеток ZnSe/ZnS, ZnSe/ZnTe, ZnS/ZnTe в модели Китинга

© Е.Н. Прыкина[¶], Ю.И. Польшгалов, А.В. Копытов

Кемеровский государственный университет,
650043 Кемерово, Россия

(Получена 24 января 2000 г. Принята к печати 16 июня 2000 г.)

В модели Китинга с учетом дальнедействующих кулоновских сил проведен расчет динамики решетки для напряженных (001) сверхрешеток ZnSe/ZnS, ZnSe/ZnTe, ZnS/ZnTe. Исследовано влияние двуслойной деформации на изменение фоннных спектров объемных материалов и сверхрешеток. Проведен анализ сдвигов исследуемых мод при напряжении как функции числа монослоев и относительной толщины составляющих композитов.

Объектом наших исследований являются напряженные полупроводниковые изокатионные сверхрешетки (СР) ZnS/ZnSe (расхождение постоянных решетки составляет $\sim 4.5\%$), ZnSe/ZnTe ($\sim 7.7\%$), ZnS/ZnTe ($\sim 12.7\%$), образованные соединениями со структурой сфалерита. В этих сверхрешетках наряду с размерными существенную роль играют деформационные эффекты. Так, возникающие при подстройке слоев напряжения приводят к существенным изменениям в энергетической зонной структуре (к снятию вырождения в зоне Бриллюэна (ЗБ), смещению краев энергетических зон), сдвигу оптических фононов по сравнению с модами объемных материалов. Нами рассмотрено влияние двуслойной деформации (сопровождающей подстройку друг к другу, а также к подложке композиционных слоев СР) на особенности изменения фоннных спектров СР ZnS/ZnSe, ZnSe/ZnTe, ZnS/ZnTe. Рассмотрены как короткопериодичные сверхрешетки, так и СР с периодами порядка и превышающими критическую толщину [1,2].

Расчет фоннных спектров сверхрешеток ZnS/ZnSe, ZnSe/ZnTe, ZnS/ZnTe проводился в рамках модели Китинга [3], качественно воспроизводящей основные особенности фоннных спектров ионно-ковалентных кристаллов и позволяющей внести ясность при интерпретации полученных результатов с точки зрения теории химической связи (эффективный заряд, силовые константы, степень ионности и ковалентности). Данная модель успешно применялась нами ранее при исследовании колебательных свойств согласованных СР [4], СР со слабым напряжением, обладающих малой степенью ионности [5]. Для оптической части спектра модель Китинга обнаруживает количественное согласие с экспериментом в пределах 10% [3–5], для области низких частот следует отметить большее расхождение с экспериментальными данными. Так, для поперечных акустических ветвей объемных композитов расхождение с экспериментом в точке X составляет порядка 40%, что является характерным для данной модели при расчете фоннных спектров двойных полупроводниковых соединений типа $A^{III}B^V$ [4,5]. Применение этой модели

к полупроводникам $A^{II}B^{VI}$, обладающим более высокой степенью ионности по сравнению с полупроводниками $A^{III}B^V$, приводит к еще большему расхождению с экспериментом [3], не меняя, однако, качественные черты фоннного спектра, полученного в более сложных теоретических моделях [6].

Короткодействующее взаимодействие, учитываемое до второй координационной сферы в модели Китинга, описывается двумя типами силовых констант: α (центральное взаимодействие) и β (нецентральное). Кулоновская часть динамической матрицы строилась в модели жестких ионов. Параметры модели (см. таблицу) определялись подгонкой под экспериментальные значения длинноволновых продольной ω_{LO} и поперечной ω_{TO} оптических частот и упругих постоянных C_{11} и C_{12} объемных кристаллов. На гетерогранице β полагался равным среднему значению соответствующих параметров объемных композитов. Из таблицы видно, что при переходе от сульфидов к теллуридам наблюдается уменьшение доли ионной составляющей химической связи (величина эффективного заряда Z). Влияние напряжения в слоях на динамику СР учитывалось геометрически через пуассоновское смещение атомов в направлении роста. При этом нами рассмотрено два случая: постоянная решетки, параллельная границе, равна постоянной решетки подложки и "свободное положение" СР, при котором на гетерогранице слой материала с меньшей постоянной решетки растягивается, с большей — сжимается, обеспечивая равновесное значение $a_{||}$ [7].

Нами рассчитаны частотные сдвиги $\Delta\omega = \omega(\text{СР}) - \omega(\text{ZnS(Se)})$ ZnS-подобных LO-фононов СР $(\text{ZnS})_n(\text{ZnSe})_n$, $(\text{ZnS})_n(\text{ZnTe})_n$ по сравнению с LO-модой объемного ZnS- и ZnSe-подобных LO-фононов

Параметры силового взаимодействия полупроводниковых $A^{II}B^{VI}$ (α и β приведены в единицах 10^3 дин/см, Z — в единицах заряда электрона)

Соединение	α	β	Z
ZnS	41.38	4.83	0.902
ZnSe	32.50	4.23	0.837
ZnTe	28.50	4.43	0.745

[¶] E-mail: lena@asdul.kuzbe.elektra.ru

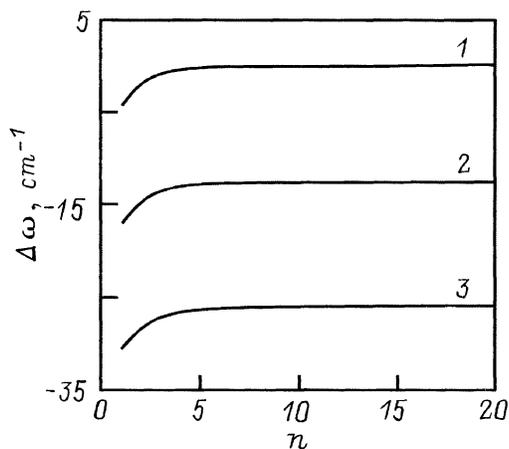


Рис. 1. Сдвиг частот ZnS-подобных LO-мод CP $(\text{ZnS})_n(\text{ZnSe})_n$ $\Delta\omega = \omega(\text{CP}) - \omega(\text{ZnS})$ с изменением числа монослоев n . 1 — подложка ZnS, 2 — свободное положение CP, 3 — подложка ZnSe.

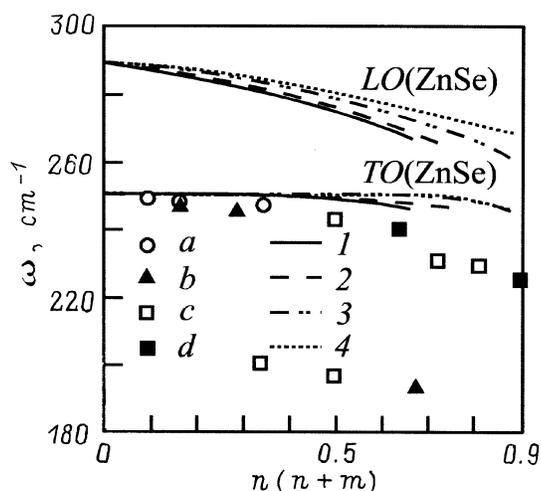


Рис. 2. Частоты ZnSe-подобных LO- и TO-мод CP $(\text{ZnSe})_m(\text{ZnTe})_n$ как функция относительной толщины слоев $n/(n+m)$, где n — число монослоев ZnTe, m — число монослоев ZnSe. Расчет в модели Китинга: 1 — $n = 2$, 2 — $n = 3$, 3 — $n = 8$, 4 — $n = 16$. Экспериментальные значения [8]: a — $n = 2$, b — $n = 3$, c — $n = 8$, d — $n = 16$.

CP $(\text{ZnSe})_n(\text{ZnTe})_n$ по сравнению с LO-модой объемного ZnSe. Для CP ZnS/ZnSe как в случае подложки ZnSe, так и в случае свободного положения CP наблюдается уменьшение частоты ZnS-подобных LO-мод по сравнению со значением частоты LO-моды объемного ZnS (рис. 1). Так, в случае подложки ZnSe этот сдвиг составляет при $n = 1$ $\Delta\omega = 41 \text{ cm}^{-1}$ (это соответствует 10% от расчетного значения частоты для объемного ZnS), при $n = 20$ $\Delta\omega \approx 24 \text{ cm}^{-1}$ (6%); для свободного положения CP при $n = 1$ $\Delta\omega \approx 28 \text{ cm}^{-1}$ (7%), при $n = 20$ $\Delta\omega \approx 11 \text{ cm}^{-1}$ (2%). Как видно из рис. 1, наибольший сдвиг ZnS-подобных LO-мод

CP $(\text{ZnS})_n(\text{ZnSe})_n$ наблюдается для монослойных CP. Аналогичные закономерности для сдвигов ZnS- и ZnSe-подобных мод проявляются для CP ZnS/ZnTe, ZnSe/ZnTe.

Проведена оценка процентного вклада объемных мод в колебательные состояния исследуемых CP с использованием методики, представленной в [4]. Так, верхняя ZnS-подобная LO-мода рассматриваемых CP имеет преимущественный вклад из центра ЗБ сфалерита, а для CP ZnS/ZnSe (свободное положение CP) при $n = 1$ вклад фоновых состояний объемного сульфида цинка в колебательное состояние исследуемой моды составляет 75%, при $n = 5$ — 50%. Таким образом, с увеличением числа монослоев возрастает вклад из боковых точек зоны Бриллюэна сфалерита.

Для рассматриваемых CP получены зависимости частот ZnS-подобных мод CP $(\text{ZnS})_n(\text{ZnSe})_m$, $(\text{ZnS})_n(\text{ZnTe})_m$ и ZnSe-подобных мод CP $(\text{ZnSe})_n(\text{ZnTe})_m$ от относительной толщины слоев $n/(n+m)$. На рис. 2 соответствующие зависимости представлены для CP ZnSe/ZnTe. Символьные обозначения соответствуют экспериментальным данным [8], сплошная линия — расчет в модели Китинга. Из рис. 2 видно, что наш расчет исследуемых LO- и TO-фононов качественно согласуется с экспериментом. С увеличением $n/(n+m)$, (n, m — числа монослоев соединений) наблюдается понижение частот исследуемых мод. Следует отметить, что при одном значении $n/(n+m)$ и разным числе монослоев наблюдаются различные значения частот исследуемых мод, что связано с увеличением доли ZnTe в CP ZnSe/ZnTe, ZnS/ZnTe и доли ZnSe CP ZnS/ZnSe. Так, для CP ZnSe/ZnTe при $n = m = 2$ частота ZnSe-подобной LO-моды составляет $\omega \approx 275 \text{ cm}^{-1}$, а при $n = m = 16$ $\omega \approx 279 \text{ cm}^{-1}$ (значение $n/(n+m) = 0.5$).

Список литературы

- [1] L.H. Shon, K. Inoc, O. Matsuda, K. Murase. Sol. St. Commun., **67**, 779 (1988).
- [2] L.H. Shon, K. Inoc, K. Murase. Sol. St. Commun., **62**, 621 (1987).
- [3] R. Martin. Phys. Rev. B, **1**, 4005 (1970).
- [4] Е.Н. Прыкина, Ю.И. Польшгалов, А.В. Копытов. Изв. вузов. Физика. Деп. в ВИНТИ, № 3643-B98 (1998).
- [5] Е.Н. Прыкина, Ю.И. Польшгалов, А.В. Копытов. Изв. вузов. Физика. Деп. в ВИНТИ, № 3961-B98 (1998).
- [6] K. Kunc, M. Balkanski, M. Nusimovici. Phys. St. Sol. (b), **72**, 229 (1975).
- [7] М. Херман. Полупроводниковые сверхрешетки (М., Мир, 1989).
- [8] S. Nakashima, Y. Nakakura, H. Fujiyasu, K. Mochizuki. Appl. Phys. Lett., **48**, 236 (1986).

Редактор В.В. Чалдышев

Phonon spectrum of strained (001) superlattices ZnSe/ZnS, ZnSe/ZnTe, ZnS/ZnTe within Keating model

E.N. Prykina, Yu.I. Polygalov, A.V. Kopytov

Kemerovo State University,
650043 Kemerovo, Russia

Abstract Lattice dynamics of strained-layer (001) superlattices (SLs) ZnSe/ZnS, ZnSe/ZnTe, ZnS/ZnTe have been calculated within Keating model with the long-range Coulomb interaction. The influence of the biaxial stress on the change in phonon spectrum of both bulk and superlattices has been investigated. The analysis of shifts of studied modes is carried out as a function of the number of monolayers and the relative layer thickness of composites.