

## Энергетический спектр квантовых ям в структурах типа РbTe/РbEuTe из данных по фотолюминесценции

И. И. Засавицкий<sup>1)</sup>, Е. В. Бушуев, Э. А. де Андрада-и-Силва<sup>\*2)</sup>, Э. Абрамов<sup>\*2)</sup>

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

\* Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE, 12201 Sao Jose dos Campos, SP, Brazil

Поступила в редакцию 22 апреля 2002 г.

Показано, что энергии излучательных переходов между основными состояниями электронов и дырок для высококачественных глубоких квантовых ям РbTe при низких температурах хорошо описываются в рамках двухзонной модели с учетом непараболичности, сильной анизотропии и многодолинности зонной структуры, а также одноосной деформации, присутствующей в гетероструктурах. Для двумерной системы обнаружено уменьшение температурного коэффициента изменения ширины запрещенной зоны с уменьшением ширины ямы, что объясняется ослаблением электрон-фононного взаимодействия.

PACS: 78.55.-x, 78.66.Li

Исследованию влияния размерного квантования на энергетический спектр структур с квантовыми ямами на основе полупроводников  $A^4B^6$  посвящен ряд работ [1–6]. В квантоворазмерных структурах типа РbTe/РbEuTe изучалось главным образом оптическое поглощение, дающее информацию о высоколежащих квантовых состояниях. При интерпретации результатов в рамках как шестизонной [5], так и более простых [1–3, 6] моделей учитывалось также влияние одноосной деформации. Однако используемые различными авторами значения констант деформационного потенциала отличались в несколько раз, что оставляет вопрос о значении этих констант открытым.

В настоящей работе изучалось влияние размерного квантования и температуры на энергетический спектр структур с квантовыми ямами типа РbTe/РbEuTe, где  $E_g$  для барьера РbEuTe достигает значений  $\sim 0.5$  эВ, а для РbTe, выступающего в роли квантовой ямы,  $E_g$  составляет 0.189 эВ в объемном материале при 4 К. Расчетный спектр сравнивался с данными из спектров фотолюминесценции (ФЛ), которая дает точную информацию о крае зон. Энергии излучательных переходов между основными состояниями в зоне проводимости и валентной зоне хорошо описываются в рамках двухзонной модели с учетом непараболичности, сильной анизотропии и многодолинности РbTe, а также одноосной деформации, присутствующей в квантовых ямах. Кроме того, в дву-

мерной системе наблюдалось уменьшение коэффициента  $dE_g/dT$  с уменьшением ширины ямы.

Гетероструктуры типа РbTe/РbEuTe выращивались на свежесколотых подложках (111)BaF<sub>2</sub> методом молекулярно-лучевой эпитаксии [7]. Чтобы устранить последствия сильного рассогласования постоянной решетки с подложкой ( $\Delta a/a \sim 4.5\%$ ), сначала выращивался толстый ( $\sim 4$  мкм) буферный слой Рb<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>Te ( $x \approx 0.06$ ). Затем выращивалась квантовая яма РbTe различной ширины (от 2.3 до 18 нм) и барьер Рb<sub>1-x</sub>Eu<sub>x</sub>Te того же состава, что и буферный слой, и с толщиной  $\sim 50$  нм. В такой последовательности создавалось 50 квантовых ям высокого качества. Качество проверялось на рентгеновском дифрактометре высокого разрешения, с помощью которого наблюдалось до 10 брэгговских сателлитов. Из рентгеновских измерений [6] определялся период структуры, ширина ямы и величина механических напряжений  $\varepsilon_{||}$ , возникающая из-за рассогласования постоянных решетки ( $\Delta a/a \sim 0.3\%$ ) между ямой и барьером. Имеет место изоморфный рост, так как используемые ширины ям меньше критической толщины.  $E_g$  для барьера определялась из спектров оптического поглощения.

Спектры ФЛ измерялись при 4.2 и 77.4 К. Возбуждение осуществлялось импульсным АИГ-лазером ( $h\nu = 1.17$  эВ). Для анализа спектров излучения использовался решеточный ИК монохроматор, приемник излучения на основе Ge:Аи и стробоскопический преобразователь напряжения В9-5, что позволяло работать с энергетическим разрешением  $< 0.5$  мэВ. Отметим, что это разрешение в несколько раз лучше, чем соответствующее разрешение для низколе-

<sup>1)</sup> e-mail: zasavit@sci.lebedev.ru

<sup>2)</sup> Е. А. de Andrada e Silva, Е. Abramof.

жащих состояний в спектрах оптического поглощения. Уровень возбуждения достигал относительно больших значений (до  $10^5$  Вт/см<sup>2</sup>).

Спектр излучения, как правило, состоял из одной линии вынужденного излучения, полуширина которой в зависимости от образца составляла 1–3 мэВ. Для высококачественных эпитаксиальных слоев типа  $A^4B^6$  излучательные переходы происходят с сохранением квазиимпульса, и линия вынужденного излучения возникает с резкой низкоэнергетической стороны линии спонтанного излучения [8]. Таким образом, положение линии вынужденного излучения с хорошей точностью соответствует краю зоны. Поправка на  $E_g$ , обусловленная многочастичными взаимодействиями в кристалле, мала ( $\sim 1$  мэВ при  $n, p \leq 10^{17}$  см<sup>-3</sup> [9]) из-за малой эффективной массы и высокой диэлектрической проницаемости в полупроводниках типа  $A^4B^6$ . Оптическое поглощение дает завышенное (на несколько мэВ) значение энергии перехода из-за конечной концентрации носителей заряда в полупроводниках  $A^4B^6$ , что приводит к эффекту заполнения зон.

Благодаря квантованию, энергия излучательных переходов возрастала с уменьшением ширины ямы при обеих температурах (рис.1). Обращает внимание также увеличение интенсивности излучения с умень-

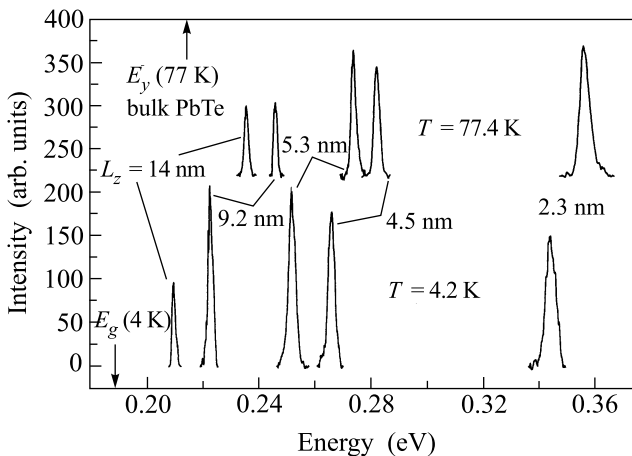


Рис.1. Спектры излучения структур с квантовыми ямами типа  $PbTe/PbEuTe$  в зависимости от ширины ямы при температуре 4 и 77 К

шением ширины ямы, что обусловлено увеличением электронного ограничения для неравновесных носителей заряда.

Для выделенного кристаллографического направления [111], определяемого ориентацией подложки  $BaF_2$ , четыре эквивалентные долины в  $PbTe$  разделяются на одну основную долину с продольной массой

квантования и три наклонные долины с массой квантования, близкой к поперечной массе. Из-за большого коэффициента анизотропии ( $K \approx 10$ ) уровни размерного квантования в наклонных долинах сильно уходят вглубь зоны, и поэтому излучательные переходы происходят в основной долине. Помимо междолинного расщепления, имеет место деформационный сдвиг в высокоэнергетическую сторону, который для основной долины примерно в 4 раза больше, чем для наклонных долин. Однако при используемой ширине ям  $L_z < 20$  нм квантоворазмерный сдвиг является определяющим в расположении нижних уровней [3].

Энергии оптических переходов в квантовых ямах были рассчитаны аналитически в рамках двухзонной модели с зеркальной симметрией непараболических зон и в приближении огибающей функции [10]. Полагалось, что разрывы зоны проводимости и валентной зоны одинаковы ( $\Delta E_c = \Delta E_v$ ), а глубокие квантовые ямы в соответствии с рентгеновскими данными имеют прямоугольную форму. Изменение энергии, обусловленное одноосной деформацией  $\epsilon_{\perp}$ , направленной перпендикулярно гетероструктуре, вычислялось из выражений:

$$\delta E_l = (0.92D_d - 1.08D_u)\epsilon_{\perp} \quad \text{для основной долины,}$$

$$\delta E_o = (0.92D_d + 0.77D_u)\epsilon_{\perp} \quad \text{для наклонных долин, и}$$

$$\epsilon_{\perp} = -1.08\epsilon_{\parallel}.$$

Здесь численные коэффициенты учитывают упругие константы, которые слабо зависят от температуры. Значения констант оптических деформационных потенциалов  $D_d = 4.3$  эВ и  $D_u = -2.8$  эВ взяты из [3]. Тогда при  $\epsilon_{\perp} = 3 \cdot 10^{-3}$  получаем  $\delta E_l/\delta E_o \approx 4$ , а величина  $\delta E_l \approx 20$  мэВ представляет заметный ( $\sim 10\%$ ) сдвиг для узкощелевого полупроводника.

На рис.2 показаны зависимости энергии оптических переходов от ширины ямы при двух температурах. Видно, что данные по ФЛ хорошо согласуются с расчетными кривыми для переходов в основной долине. Такое согласие достигается только при учете измеренной деформации и при использовании значений констант деформационных потенциалов, определенных в [3]. Учитывалось также то, что деформация зависит от ширины ямы, уменьшаясь на  $\sim 20\%$  при увеличении ширины ямы до 20 нм. Расчетные кривые на рис.2 для гладкости приведены для некоторого среднего значения деформации  $\epsilon = 2.5 \cdot 10^{-3}$ , хотя сопоставление с экспериментом проводилось для каждого образца с учетом измеренной в нем деформации и величины барьера. Поскольку ямы относительно глубокие, то расчетная кривая для основного состоя-

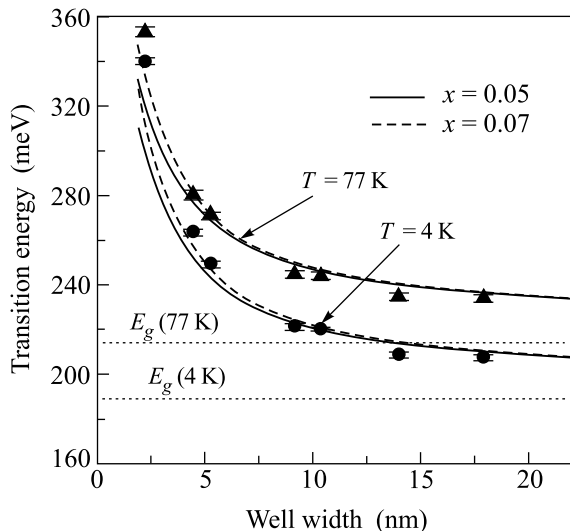


Рис.2. Зависимость энергии излучательных переходов от ширины ямы при температуре 4 и 77 К. Кривые линии соответствуют расчету оптических переходов в основной долине при средней деформации  $\varepsilon = 2.5 \cdot 10^{-3}$ . Пунктирные прямые соответствуют  $E_g$  для толстого (2 мкм) эпитаксиального слоя PbTe

ния практически не зависит от вариации содержания европия в барьерах в пределах  $0.05 \leq x \leq 0.07$ .

Таким образом, определяемые из люминесцентных данных энергии для оптических переходов между основными состояниями электронов и дырок в глубоких квантовых ямах PbTe хорошо согласуются с результатами расчета в рамках двухзонной модели [10], хотя для высоколежащих состояний необходимы более сложные расчеты в рамках шестизонной модели [5]. Этот результат в сочетании с измеренными механическими напряжениями в гетероструктурах PbTe/PbEuTe позволяет заключить, что найденные значения констант оптических деформационных потенциалов являются наиболее надежными. Отметим, что данный подход был нами успешно применен также для интерпретации результатов низкотемпературной ФЛ глубоких напряженных квантовых ям типа PbSe/PbSrSe, в которых принятое расположение квантоворазмерных уровней [3] было недавно подтверждено путем измерения спектров поглощения [11].

Зависимость ширины запрещенной зоны  $E_g$  от температуры определяется коэффициентом  $dE_g/dT$ , который для полупроводников типа  $A^4B^6$  положителен. В случае объемного кристалла PbTe он равен  $+4.5 \cdot 10^{-4}$  эВ/К в области температур 50–300 К. При этом вклад, обусловленный изменением постоянной решетки с температурой, составляет

$3\alpha B(dE_g/dP)_T = +1.7 \cdot 10^{-4}$  эВ/К, где  $\alpha$  – коэффициент линейного термического расширения,  $B$  – объемный модуль упругости и  $(dE_g/dP)_T$  – барический коэффициент. Следовательно, остальная часть (около 60%) обусловлена электрон-фононным взаимодействием. При низких ( $< 50$  К) температурах коэффициент  $dE_g/dT$  убывает, стремясь к нулю, поскольку уменьшается электрон-фононное взаимодействие и в соответствии с теоремой Нернста  $\alpha \rightarrow 0$ .

Расчет коэффициента  $dE_g/dT$  для низкоразмерных систем отсутствует. Опыт показывает, что данный коэффициент уменьшается с уменьшением размера квантоворазмерного объекта. В частности, в работе [12] из спектров поглощения квантовых точек PbS и PbSe показано, что с уменьшением размера квантовых точек коэффициент  $dE_g/dT$  падает до нуля и даже меняет знак. В настоящей работе аналогичный эффект наблюдался в спектрах поглощения и спектрах ФЛ двумерной системы PbTe/PbEuTe. Однако точность измерения коэффициента  $dE_g/dT$  по спектрам поглощения относительно невелика, особенно при низких температурах, где этот коэффициент нелинейно стремится к нулю, что, возможно, и приводит к инверсии знака. Поэтому нами определялась из спектров ФЛ разность  $\Delta E_g = E_g(77 \text{ K}) - E_g(4 \text{ K})$ . Здесь под  $E_g$  подразумевается энергия излучательного перехода между основными состояниями электрона и дырки. Для PbTe этот подход важен еще и потому, что в этом материале при повышенных температурах снижается квантовый выход излучения из-за междолинной оже-рекомбинации. Из рис.3 видно, что с уменьшением ширины ямы разность  $\Delta E_g$  сильно убывает (более чем в два раза для ямы с шириной

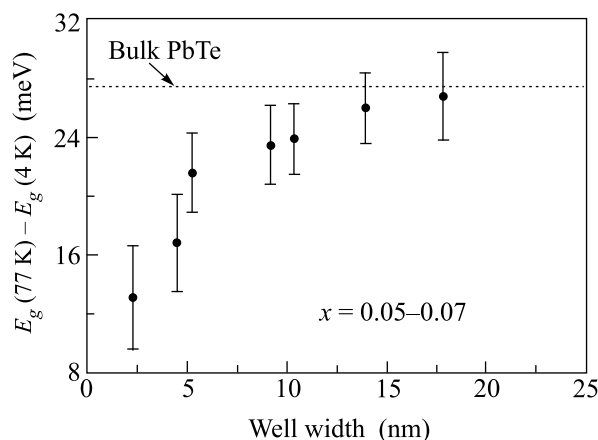


Рис.3. Разность  $\Delta E_g = E_g(77 \text{ K}) - E_g(4 \text{ K})$  в зависимости от ширины ямы PbTe. Штриховой линией показано значение этой разности для объемного материала

$L_z = 2.3$  нм по сравнению с объемным кристаллом), однако знак ее не меняется. Таким образом, для двумерной системы  $PbTe/PbEuTe$  коэффициент  $dE_g/dT$  также уменьшается с уменьшением ширины ямы до 2.3 нм, но знак не меняет.

Поскольку вклад, обусловленный температурным изменением постоянной решетки, слабо зависит от ширины ямы, то экспериментальный результат свидетельствует об изменении вклада в  $dE_g/dT$ , обусловленного электрон-фононным взаимодействием. В двумерной системе возникают ограниченные 2D фононы и интерфейсные фононы, распространяющиеся вдоль плоскости квантовой ямы. Хотя роль интерфейсных фононов возрастает при уменьшении ширины ямы, их вклад в электрон-фононное взаимодействие относительно невелик. Для 2D фононов длинноволновые моды, распространяющиеся перпендикулярно плоскости ямы, не существуют. Поэтому в ионном 2D кристалле полярное взаимодействие уменьшается. Следовательно, наблюдаемое уменьшение  $\Delta E_g$  с уменьшением ширины ямы свидетельствует об ослаблении электрон-фононного взаимодействия в 2D системе, что согласуется с результатами расчетов (см. [13] и ссылки в ней).

Таким образом, энергии излучательных переходов между основными состояниями в зоне проводимости и валентной зоне в высококачественных структурах  $PbTe/PbEuTe$  с глубокими квантовыми ямами хорошо описываются в рамках двухзонной модели с учетом непараболичности, сильной анизотропии и многодолинности зонной структуры. С учетом из-

меренных механических напряжений это позволило надежно определить значения оптических деформационных потенциалов для  $PbTe$ . Обнаружено, что в 2D системе при уменьшении ширины ямы коэффициент  $dE_g/dT$  уменьшается, что объясняется ослаблением электрон-фононного взаимодействия.

1. D. L. Partin, IEEE J. Quantum Electron. **24**, 1716 (1988).
2. A. Ishida, Y. Sase, and H. Fujiyasu, Appl. Surf. Sci. **33/34**, 868 (1988).
3. M. V. Valeiko, I. I. Zasavitskii, A. V. Matveenko et al., Superlattices and Microstructures **9**, 195 (1991).
4. G. Springholz, M. Kriechbaum, W. Hofmann et al., Superlattices and Microstructures **13**, 25 (1993).
5. S. Yuan, G. Springholz, G. Bauer et al., Phys. Rev. **B49**, 5476 (1994).
6. E. Abramof, E. A. de Andrada e Silva, S. O. Ferreira et al., Phys. Rev. **B63**, 085304 (2001).
7. E. Abramof, P. H. O. Rappl, A. Y. Ueta et al., J. Appl. Phys. **88**, 1 (2000).
8. Д. М. Гуреев, О. И. Даварашвили, И. И. Засавицкий и др., ФТП **9**, 1902 (1975).
9. R. Rupprecht and H. Pascher, Phys. Rev. **B50**, 16931 (1994).
10. E. A. de Andrada e Silva, Phys. Rev. **B60**, 8859 (1999).
11. H. Z. Wu, N. Dai, M. B. Johnson et al., Appl. Phys. Lett. **78**, 2199 (2001).
12. A. Olkhovets, R.-C. Hsu, A. Lipovskii et al., Phys. Rev. Lett. **81**, 3539 (1998).
13. N. Sawaki, J. Phys. C: Solid State Phys. **19**, 4965 (1986).