

УДК 535.361

## ДИНАМИКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ СПЛАВОВ $Cd_{1-x}Hg_xTe$ И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ АНАЛИЗА СВЕРХРЕШЕТОК $CdTe-HgTe$

С. П. Козырев, Л. К. Водопьянов

*Анализ решеточного колебательного спектра отражения сплавов  $Cd_{1-x}Hg_xTe$  использовался для получения концентрационных зависимостей сил осцилляторов  $HgTe$  и  $CdTe$  колебаний. Проводилось сравнение с силами осцилляторов сверхрешеток  $HgTe-CdTe$ , полученными из анализа их спектров отражения. Это позволило определить компонентный состав и структурное совершенство основных слоев и границ раздела. Среди исследуемых образцов обнаружена структура с резкими слоями и практическим отсутствием сплава на границе раздела.*

1. *Введение.* Большой интерес к сверхрешеткам  $HgTe-CdTe$  связан с их привлекательностью для использования в качестве современных ИК детекторов. Но для таких применений необходимо иметь высококачественные структуры с резко очерченными слоями, в которых взаимодиффузия была бы сведена к минимуму. Решеточная колебательная ИК спектроскопия является хорошим инструментом для контроля структурного совершенства сверхрешеток. В последнее время были разработаны высококачественные ИК детекторы, основанные на межподзонных переходах в полупроводниковых сверхрешетках [1]. Молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ) позволяет осуществлять точный подбор наиболее важных параметров таких приборов. Сверхрешетки  $HgTe-CdTe$ , в которых реализуется необычное сочетание слоев полуметалла  $HgTe$  и полупроводника  $CdTe$ , имеющих близкие параметры решетки, были предложены [2] в качестве нового материала для ИК оптоэлектронных приборов. Предполагалось, что такое сочетание будет обладать уникальными свойствами [3]. Однако реализация этих

свойств требует высокого структурного совершенства таких сверхрешеток, исключая диффузию катионов в соседние слои. В системе  $HgTe-CdTe$  это требование вряд ли может быть выполнено из-за высокого давления паров  $Hg$  даже для случая низкотемпературного метода МЛЭ.

Эффекты уширения границ раздела между двумя полупроводниковыми слоями изучались с использованием оптических методов несколькими авторами [4 – 6]. В последнее время в работах [7 – 10] изучалось влияние уширения границы раздела на частоты ограниченных фононов в короткопериодных сверхрешетках  $GaAs-AlAs$ . В [8 – 10] изучали влияние шероховатости границы раздела на частоты ЛО и ТО ограниченных фононов. Б. Самсон и др. [11] для объяснения поведения фононов, распространяющихся нормально к слоям сверхрешетки  $GaAs-AlAs$ , предложили одномерную локально-модовую модель. На основе этой модели были проанализированы результаты измерений комбинационного рассеяния света и длинноволнового инфракрасного (ДИК) отражения. Были также количественно объяснены эффекты уширения границы раздела. Однако все эти публикации были посвящены сверхрешеткам  $GaAs-AlAs$ . До недавнего времени мало было известно об эффектах уширения в сверхрешетках  $CdTe-HgTe$ . В [12, 13] было показано, что ДИК спектроскопия может служить хорошим методом для оценки структурного совершенства и уширения в сверхрешетках  $CdTe-HgTe$ .

В данной работе мы изучали ширину и композиционный профиль границы раздела сверхрешеток  $CdTe-HgTe$ , используя метод длинноволновой инфракрасной спектроскопии. Суть нашего подхода состоит в обнаружении в сверхрешетках колебательных мод, присущих твердому раствору. Для интерпретации колебательных спектров отражения сверхрешеток и сплавов  $CdTe-HgTe$  мы использовали разработанную нами ранее [14] модель, основанную на пяти базисных ячейках. Согласно этой модели для сплава любого состава положение и профиль колебательных полос отражения определяется пятью решеточными модами с частотами, не зависящими от состава сплава. Последний изменяет только силы осцилляторов этих мод. Эта модель позволяет количественно объяснить эффекты сегрегации в сплавах  $(CdHg)Te$ . Сравнение сил осцилляторов сверхрешеток  $HgTe-CdTe$  и объемных сплавов, полученных из анализа их ИК спектров, позволило нам определить ширины и состав границ раздела сверхрешеток.

2. *Модель и допущения.* Очень хорошая модель, предложенная Самсоном и др. [11] для объяснения уширения границы раздела в сверхрешетках  $GaAs-AlAs$ , к сожалению, не применима в случае сверхрешеток  $HgTe-CdTe$ . Эта модель основывается на классической концепции, предложенной Чангом и Митрой [15], предполагающей двухмо-

довое поведение и хаотическое распределение примесей в сплавах. В случае системы  $(CdHg)Te$  эта концепция не может быть использована из-за проявляющихся в этих сплавах эффектов сегрегации (кластеры, упорядоченные фазы).

Ранее мы предложили модель, которая, принимая во внимание возможные корреляции в пространственном распределении атомов, удовлетворительно объясняет поведение сплавов  $(CdHg)Te$ . Эта модель основывается на предположении, что сплав  $Cd_{1-x}Hg_xTe$  формируется пятью базисными  $n$ -ячейками ( $n = 0, 1, 2, 3, 4$ ). Каждая базисная ячейка образует тетраэдр с анионом  $Te$  в центре и катионами  $Cd$  и  $Hg$  в узлах. Для ячейки  $n = 0$  все четыре угла заняты ионами  $Cd$ , для  $n = 1$  они заняты тремя ионами  $Cd$  и одним ионом  $Hg$  и т.д. Решетки бинарных соединений  $CdTe$  и  $HgTe$  формируются ячейками соответственно  $n = 0$  и  $n = 4$ . В качестве первого приближения, принимая во внимание преимущественно ковалентный характер связей в тетраэдрических соединениях, мы можем пренебречь взаимодействием между ячейками. Модель учитывает возможную тенденцию ионов  $Cd$  и  $Hg$  образовывать кластеры путем введения вероятности  $P_{HH}$  обнаружить в базисной ячейке ион  $Hg$  рядом с другим ионом  $Hg$  (или ионов  $Cd - P_{CC}$ ). Для хаотического распределения катионов эта вероятность пропорциональна составу сплава  $x$  (или  $1 - x$ ), для случая сегрегации она отклоняется от прямой пропорциональности. Каждой базисной конфигурации соответствует одна колебательная мода  $Cd-Te$  или  $Hg-Te$ . Для  $n = 0$  возможны только колебания  $Cd-Te$ , в то время как для  $n = 4$  имеют место только колебания  $Hg-Te$ . Набор базисных ячеек с пятью катионными конфигурациями может обнаруживать четыре колебательные моды  $Cd-Te$  с частотами  $\omega_n^C$  и четыре моды  $Hg-Te$  с частотами  $\omega_n^H$ . Данные измерений EXAFS [16] показывают, что длины связей  $Cd-Te$  и  $Hg-Te$  в  $(HgCd)Te$  остаются равными длинам связей в образующих бинарных соединениях для любого состава сплава и что размеры базисных ячеек  $Cd(4-x)Hg(x)Te$  не изменяется. Таким образом, частоты решеточных мод  $\omega_n^H$  и  $\omega_n^C$  не должны зависеть от состава. Эта зависимость должна проявляться только через силы осцилляторов. Анализ сил осцилляторов решеточных мод для каждого состава сплава позволяет получить информацию об относительном содержании определенных базисных ячеек в этом составе.

В [14] мы провели подробное исследование объемных сплавов  $Cd_{1-x}Hg_xTe$  ( $0 < x < 1$ ). Анализ полученных результатов позволил определить природу катионного замещения и объяснить дополнительную структуру в отражении, предполагая нехаотическое распределение различных катионов вокруг общего аниона. Используя модель, описанную выше, мы предложили новый метод анализа и интерпретацию решеточных спектров

отражения  $Cd_{1-x}Hg_xTe$ , которые согласуются с последними исследованиями локальной структуры полупроводниковых сплавов.

Рассмотрим математическую обработку экспериментальных спектров отражения сверхрешеток и сплавов  $CdTe-HgTe$ . Для анализа ДИК спектров отражения свободной сверхрешетки (без подложки) мы можем использовать длинноволновую диэлектрическую функцию, предложенную в [18]

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

где  $\hat{\epsilon}_i(\omega)$  и  $d_i$  – диэлектрическая функция и ширина  $i$ -го слоя в пределах периода сверхрешетки  $D = \Sigma d_i$ . Выражение (1) справедливо, если выполняется условие пространственной однородности в каждом слое, т.е. когда длина волны и глубина скин-слоя превышают  $d_i$ . Для длинноволнового ИК излучения это условие выполняется.

На практике обычно изучают сверхрешетку, помещенную сверху объемной подложки. В первом приближении рассмотрим сверхрешетку в качестве слоя (пленки), не вдаваясь в подробности ее состава. Тогда амплитуда коэффициента отражения для нормального падения структуры, состоящей из полубесконечной подложки (с диэлектрической функцией  $\hat{\epsilon}_3$ ) и поверхностного слоя (с диэлектрической функцией  $\hat{\epsilon}_2$ ) толщиной  $L$ , имеет вид [19]

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

где  $\hat{r}_{12} = (1 - \hat{n}_2)/(1 + \hat{n}_2)$ ,  $\hat{r}_{23} = (\hat{n}_2 - \hat{n}_3)/(\hat{n}_2 + \hat{n}_3)$  ( $\hat{n}_2 = \sqrt{\hat{\epsilon}_2}$ ,  $\hat{n}_3 = \sqrt{\hat{\epsilon}_3}$  – коэффициенты Френеля),  $\beta = (2\pi\sqrt{\hat{\epsilon}_2}L)/\lambda$  – фазовый множитель,  $\lambda$  – длина волны. Отражательная способность  $R(\omega) = |\hat{r}_{123}(\omega)|^2$ . В [20] было показано, что при выполнении условия

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

выражение (2) может быть приведено к очень простой форме:

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

$\Delta\hat{\epsilon} = \hat{\epsilon}_2 - \hat{\epsilon}_3$  – разность между диэлектрическими функциями пленки и подложки. Соотношение (4) имеет форму уравнения Френеля для отражения от полубесконечного кристалла с эффективной диэлектрической функцией  $\hat{\epsilon}_{ef}(\omega) = (\sqrt{\hat{\epsilon}_3} - i\frac{\omega}{c}\Delta\hat{\epsilon}L)^2$ . Если



мы ограничимся спектральным интервалом, в котором мнимая часть диэлектрической функции подложки  $\epsilon_3'' = 0$ , то выражение (4) может быть приведено к виду:

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

где  $R_{13}$  – коэффициент отражения подложки. Тогда отношение коэффициента отражения структуры "пленка на подложке"  $R_{123}(\omega)$  к коэффициенту отражения подложки  $R_{13}(\omega)$  будет воспроизводить мнимую часть диэлектрической функции пленки  $\epsilon_2(\omega)$ , при условии, что выполняется неравенство (3).

Спектр отражения  $R(\omega)$  структуры "сверхрешетка на подложке" рассчитывался стандартным методом, используя (4). Диэлектрическая функция сверхрешетки  $\epsilon_{SL}(\omega)$  в классической аддитивной форме с параметрами гармонических осцилляторов решеточных мод ТО  $CdTe$  и ТО  $HgTe$  колебаний сплавов  $Cd_{1-x}Hg_xTe$  с частотами  $\omega_{tj} = \omega_n^C$  и  $\omega_n^H$  ( $n = 4, 3, 2, 1$ ) имеет вид

$$\hat{\epsilon}_{SL}(\omega) = \epsilon_\infty + \sum \frac{S_j \omega_{tj}^2}{\omega^2 - \omega_j^2 - i\omega\Gamma} + \hat{\epsilon}_{int}(\omega), \quad (6)$$

где  $\epsilon_{int}(\omega)$  учитывает межзонные электронные переходы в бесщелевом  $HgTe$  [21]. Для расчета  $R(\omega)$  мы варьировали в  $\hat{\epsilon}_{SL}(\omega)$  в основном силы осцилляторов  $S_j$  и параметры затухания  $\Gamma_j$ . Резонансные частоты  $\omega_{tj}$  фиксированы пятью возможными конфигурациями базисных ячеек.

Если нам известна диэлектрическая функция сверхрешетки  $\hat{\epsilon}_{SL}(\omega)$  как целого, то мы можем рассчитать композиционный профиль реальной сверхрешетки. Это можно сделать, используя уравнение (1). Сравнение параметров осцилляторов диэлектрической функции сверхрешетки с соответствующими параметрами объемных сплавов  $(CdHg)Te$ , полученными нами ранее, позволило определить, сплавы какого состава присутствуют в исследуемой сверхрешетке. Тогда, варьируя в уравнении (1) толщины слоев  $d_j$ , мы можем оценить эти толщины. Наши предыдущие исследования показали, что наиболее чувствительными параметрами для такого сравнения являются силы осцилляторов.

3. *Результаты и обсуждение.* Мы использовали данные по динамике кристаллической решетки сплавов  $(CdHg)Te$  для анализа спектров отражения сверхрешеток  $HgTe-CdTe$ , полученных в [12, 13]. Там исследовались две сверхрешетки со следующими параметрами:  $SL3P$  ( $d_{CdTe}/d_{HgTe} = 70/30 \text{ \AA}$ ,  $N = 170$ ,  $d_{tot} = 1,8 \mu m$ ) и  $SL1P$  ( $d_{CdTe}/d_{HgTe} =$

69/31 Å,  $N = 165$ ,  $d_{tot} = 1,8 \mu m$ ). Изучалась также структура, состоящая из двух сверхрешеток, параметры которых будут приведены ниже.

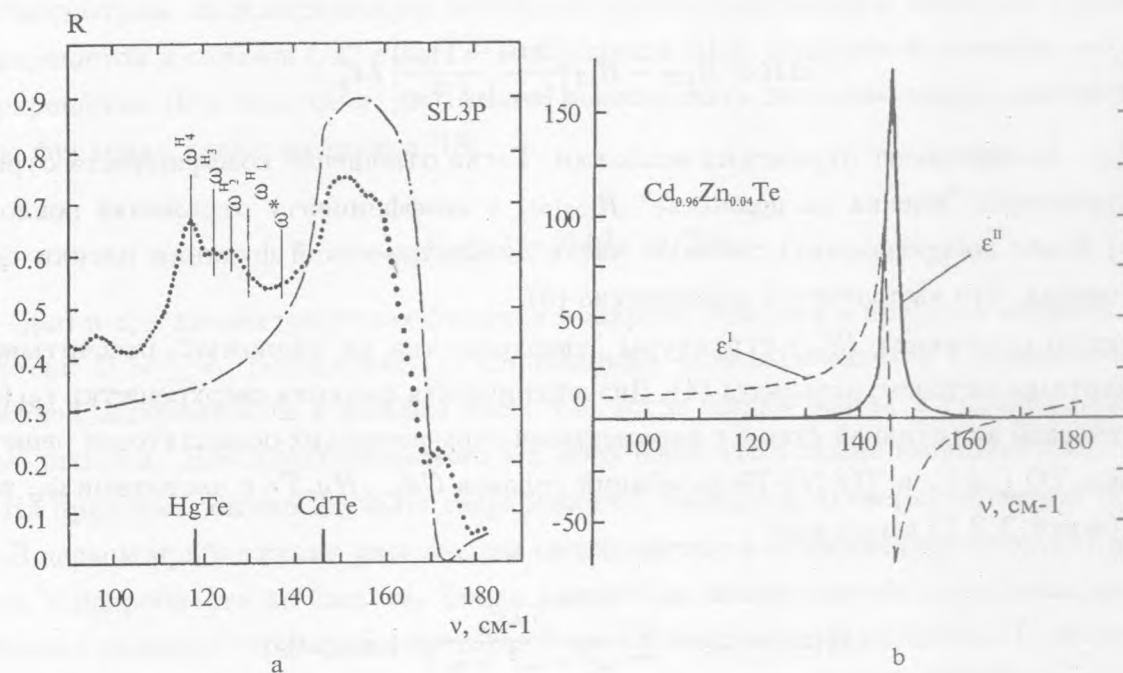


Рис. 1. а) Решеточный спектр отражения  $R$  сверхрешетки  $SL3P$  при 6 K (темные кружки) и подложки  $Cd_{0,96}Hg_{0,04}Te$  при 20 K (штрих-пунктирная кривая). Частоты колебательных мод  $Hg-Te$  сплава  $Cd_{1-x}Hg_xTe$  и частота  $137\text{ см}^{-1}$  отмечены вертикальными линиями. б) Действительная и мнимая части диэлектрической функции подложки  $Cd_{0,96}Hg_{0,04}Te$  при 20 K.

На рис. 1а представлены решеточный спектр отражения сверхрешетки  $SL3P$  при 6 K и спектр отражения подложки  $Cd_{1-x}Hg_xTe$  при 20 K. Частоты четырех колебательных мод  $Hg-Te$  для сплавов  $(CdHg)Te$  отмечены вертикальными линиями. Видно, что спектр отражения сверхрешетки  $SL3P$  в окрестности колебательной частоты бинарного соединения  $HgTe$  ( $\omega_{TO} = 118\text{ см}^{-1}$ ) характеризуется явно выраженной структурой, пики которой близки к частотам колебательных мод  $Hg-Te$  в сплавах  $Cd_{1-x}Hg_xTe$ . Аналогичные особенности тонкой структуры наблюдаются в спектрах отражения сверхрешетки  $SL1P$ .

В [12, 13] было показано, что ДИК спектры сверхрешетки не могут быть интерпретированы на основе двухмодовой модели, т.е. учитывая в диэлектрической функции сверхрешетки только два лоренцовских решеточных осциллятора с  $\omega_{TO} = 118\text{ см}^{-1}$  и

$146 \text{ см}^{-1}$ , которые соответствуют бинарным соединениям  $\text{HgTe}$  и  $\text{CdTe}$ . Это значит, что сверхрешетки  $\text{HgTe-CdTe}$  нельзя рассматривать как состоящие из идеальных слоев  $\text{HgTe}$  и  $\text{CdTe}$ . Взаимная диффузия атомов  $\text{Hg}$  и  $\text{Cd}$  между слоями, происходящая в процессе роста, приводит к более сложной картине.

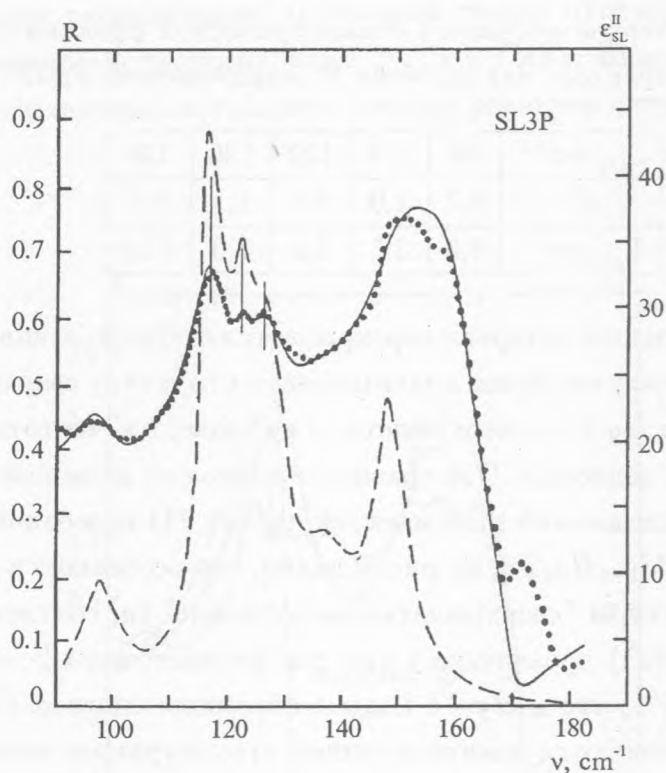


Рис. 2. Решеточный спектр отражения  $R$  сверхрешетки  $SL3P$  (темные кружки – экспериментальный спектр, сплошная линия – модельный спектр) при  $6 \text{ K}$  и диэлектрическая функция сверхрешетки  $\epsilon''_{SL}(\omega)$  (пунктирная кривая).

Используя процедуру, описанную в разделе 2, мы рассчитали отражательную способность  $R(\omega)$  сверхрешетки  $SL3P$ . Рассчитанный спектр (сплошная линия) вместе с экспериментальными данными (темные кружки) представлены на рис. 2. Видно прекрасное согласие между этими двумя спектрами. Небольшой пик в экспериментальном спектре при  $172 \text{ см}^{-1}$  обусловлен интерференцией, которая проявляется в коротковолновой области вблизи решеточной LO моды. Диэлектрическая функция сверхрешетки  $\epsilon_{SL}(\omega)$ , которая использовалась при расчете  $R(\omega)$  сверхрешетки, представлена на том же рис. 2. В табл. 1 приведены подгоночные параметры для модельной диэлектрической

функции  $\epsilon_{SL}(\omega)$ . Колебания  $Cd-Te$  представлены в системе "сверхрешетка на подложке" только одной модой с  $\omega_0^C = 146,5 \text{ см}^{-1}$ . Другие моды колебаний  $Cd-Te$  не видны,

Т а б л и ц а 1

Подгоночные параметры модельной диэлектрической функции  $\epsilon''_{SL}$ , которая использовалась для расчета  $R$  сверхрешетки  $SL3P$

$\omega_{ij}, \text{ см}^{-1}$	98	118	122	126	136
$S_j$	0,7	1,0	0,7	1,1	0,6
$\Gamma_j, \text{ см}^{-1}$	8,0	3,5	5,0	7,0	11,0

поскольку этот спектральный интервал перекрывается с областью сильной дисперсии в подложке  $CdZnTe$ . Поэтому мы будем анализировать структуру сверхрешетки, сравнивая колебательные моды  $Hg-Te$  в сверхрешетке и в сплаве, т.к. частоты этих мод лежат в области прозрачности подложки. Это сравнение возможно на основе проведенных нами ранее подробных исследований зависимостей частот ТО колебаний  $\omega_n$  и сил осцилляторов  $S_n$  от состава  $Cd_{1-x}Hg_xTe$ . Из рис. 2 видно, что особенности в отражательной способности  $R(\omega)$  структуры "сверхрешетка на подложке" (и, соответственно, диэлектрической функции  $\epsilon''_{SL}(\omega)$ ) проявляются при тех же частотах  $\omega_4^H = 118 \text{ см}^{-1}$ ,  $\omega_3^H = 122 \text{ см}^{-1}$  и  $\omega_2^H = 126 \text{ см}^{-1}$ , что и  $Hg-Te$  моды в объемных сплавах  $Cd_{1-x}Hg_xTe$ . Другими словами, они определяются доминирующими структурными элементами в чистом  $HgTe$  ( $n = 4$ ), а также в сплавах  $Cd_{0,25}Hg_{0,75}Te$  ( $n = 3$ ) и  $Cd_{0,5}Hg_{0,5}Te$  ( $n = 2$ ). Обработка экспериментальных спектров отражения [14] для этих соединений обнаружила большие значения сил осцилляторов. Кроме того, для сил осцилляторов колебаний  $Hg-Te$  мы наблюдали отклонение от модели хаотического распределения, что доказывает существование сегрегаций (упорядоченных областей или кластеров). В результате для определенных базисных ячеек, а именно,  $Cd(4-n)Hg(n)Te$  ( $n = 4, 3, 2$ ) наблюдаются большие силы осцилляторов, намного большие, чем предсказывает модель хаотического распределения. Поэтому сплавы с преобладанием базисных ячеек такого типа легко обнаружить по спектрам отражения, если даже они присутствуют в малых количествах. Из анализа спектра отражения сверхрешетки мы определили величины сил осцилляторов для колебаний  $Hg-Te$  с  $n = 4, 3, 2$ , которые соответствуют составам  $x = 1; 0,75; 0,5$ . Для всех этих колебательных резонансов мы получили большие значения сил осцилляторов, соответственно, 1,0; 0,7; 1,1; т.е. силы мод сплавов (0,7; 1,1) близки к силе чистого



$HgTe(1,0)$ . Это дает дополнительное подтверждение того, что реальная сверхрешетка  $SL3P$  не может быть представлена перемежающимися слоями бинарных соединений  $HgTe$  и  $CdTe$ . Можно предположить, что это связано с присутствием в области границы раздела реальной сверхрешетки некоторой доли сплава, связанной со взаимной диффузией  $Hg$  и  $Cd$  в процессе эпитаксиального роста. В качестве иллюстрации на рис. 3 представлен рассчитанный модельный спектр отражения сверхрешетки  $SL3P$  для случая невзаимодействующих слоев  $HgTe$  и  $CdTe$ . Видно, что этот спектр сильно отклоняется от экспериментального спектра реальной сверхрешетки  $SL3P$  (темные кружки).

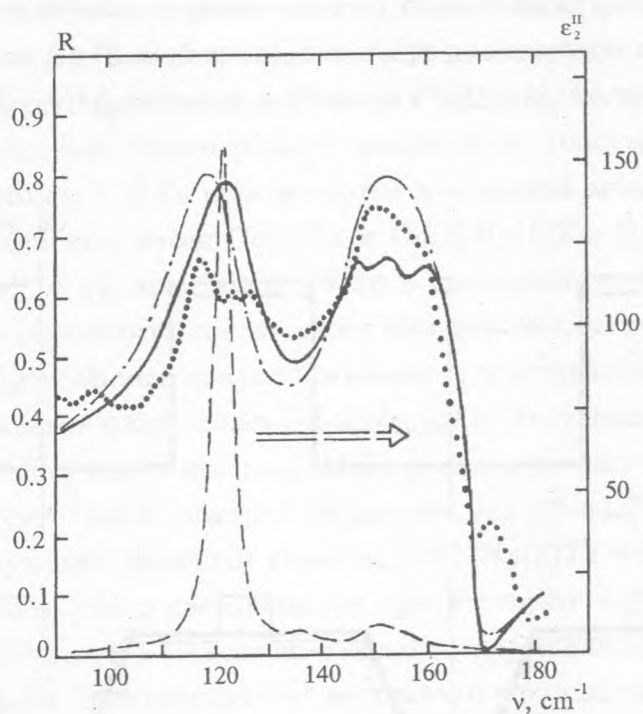


Рис. 3. Экспериментальный решеточный спектр отражения реальной сверхрешетки  $SL3P$  (темные кружки), ожидаемые решеточные спектры сплава  $Cd_{0,29}Hg_{0,71}Te$  на подложке (сплошная кривая), предполагаемой сверхрешетки  $HgTe-CdTe$  на подложке (штрихпунктирная кривая) и диэлектрическая функция  $\epsilon_2''(\omega)$  сплава  $Cd_{0,29}Hg_{0,71}Te$  (пунктирная кривая).

Из сравнения спектров отражения сверхрешетки и объемного сплава мы можем рассчитать композиционный профиль реальной сверхрешетки  $SL3P$ . Для этого мы исполь-

зуем уравнение (1), включающее диэлектрическую функцию  $\hat{\epsilon}_n(\omega)$  и толщину  $n$ -го слоя  $d_n$ . Затем мы предполагаем, что период сверхрешетки включает пять слоев согласно числу возможных базовых ячеек ( $n = 0, 1, 2, 3, 4$ ). В этом случае мы имеем диэлектрическую функцию вида [18]:

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

Так как диэлектрическая функция  $\hat{\epsilon}_n(\omega)$  для каждого из этих слоев известна из наших предыдущих исследований объемных сплавов [14], мы можем определить толщину каждого слоя путем подгонки  $d_n$  в уравнении (7). Экспериментальный спектр отражения сверхрешетки *SL3P* обнаруживает присутствие четырех преобладающих структурных элемента с  $n = 4, 3, 2$  и подстановка  $d_4, d_3$ , и  $d_2$  ( $d_1$  и  $d_0 = 0$ ) в уравнение (7) дает нам следующие толщины слоев: для  $HgTe$   $d_4 = 23 \text{ \AA}$ , для  $Cd_{0,25}Hg_{0,75}Te$   $d_3 = 16 \text{ \AA}$ , и для  $Cd_{0,5}Hg_{0,5}Te$   $d_2 = 52 \text{ \AA}$ .

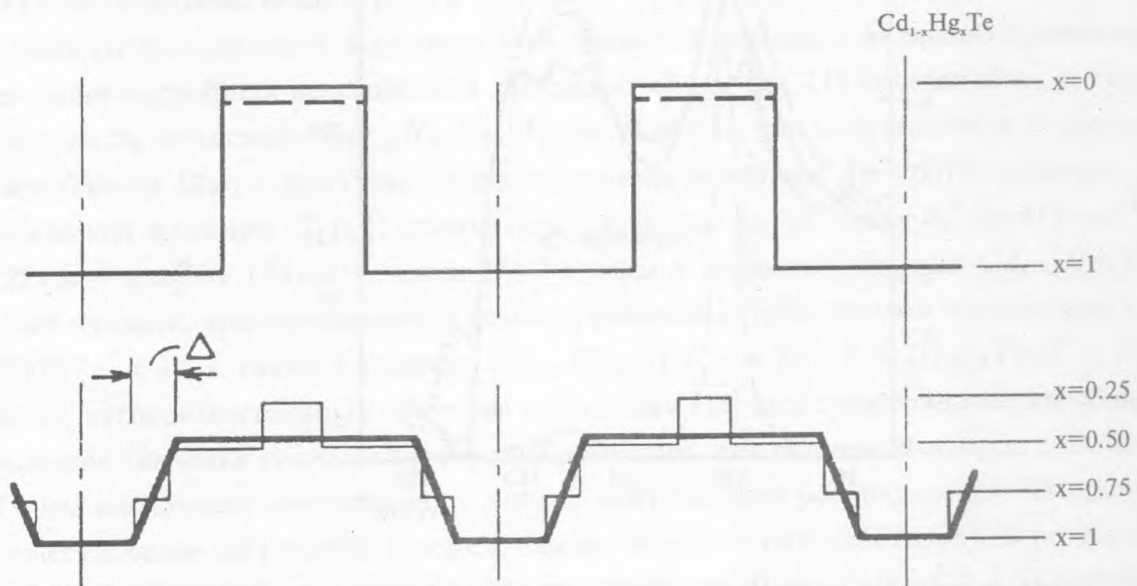


Рис. 4. Предполагаемый композиционный профиль сверхрешетки *SL3P* (верхняя часть) и композиционный профиль реальной сверхрешетки (нижняя часть), полученный из анализа спектра решеточного отражения.

На рис. 4 представлен композиционный профиль сверхрешетки *SL3P*, полученный из анализа решеточного спектра отражения. Этот профиль соответствует сверхрешетке

$HgTe-Cd_{0,5}Hg_{0,5}Te$  с межслоевой областью, состоящей из сплава  $Cd_{1-x}Hg_xTe$  ( $x > 0,5$ ) переменного состава.

Более совершенный композиционный профиль был найден для структуры ВМССТ1, состоящий из двух сверхрешеток с  $d_{HgTe}/d_{CdTe} = 22/54 \text{ \AA}$ ,  $N = 180$ ,  $d_{dot} = 1,4 \text{ мм}$  и  $d_{HgTe}/d_{CdTe} = 56/54 \text{ \AA}$ ,  $N = 70$ ,  $d_{tot} = 0,8 \text{ мм}$ , выращенных на подложке  $CdTe$  (100). Экспериментальный спектр решеточного отражения и рассчитанный спектр этой структуры показаны на рис. 5. Параметры решеточных осцилляторов, которые мы использовали для подгонки модельной диэлектрической функции  $\hat{\epsilon}_{SL}(\omega)$  для структуры ВМССТ1 (табл. 2), определяются модами  $\omega_4^H = 118,5 \text{ см}^{-1}$  и  $\omega_1^H = 129 \text{ см}^{-1}$  базисных ячеек  $Hg(4)$  и  $Cd(3)Hg(1)Te$ . Наблюдаемая особенность при  $115 \text{ см}^{-1}$  обусловлена модой  $\omega_4^H$  колебания  $Hg-Te$ , возникающей из расщепления объемной моды  $118,5 \text{ см}^{-1}$  объемного кристалла  $HgTe$ . Возможно, что такое расщепление связано с размерным эффектом в сверхрешетке, образованной тонкими слоями  $HgTe$  толщиной  $22 \text{ \AA}$  (примерно три постоянных решетки), помещенными между более толстыми барьерными слоями  $Cd_{1-x}Hg_xTe$ . Колебания  $Cd-Te$  определяются в основном модами  $\omega_0^C = 146,5 \text{ см}^{-1}$  и  $\omega_1^C = 148,5 \text{ см}^{-1}$  базисных ячеек  $Cd(4)Te$  и  $Cd(3)Hg(1)Te$ . Из отношения сил осцилляторов для мод  $\omega_0^C$  и  $\omega_1^C$  колебаний  $Cd-Te$  в сверхрешетке (табл. 2) и в объемных кристаллах можно определить состав слоев при условии, что их толщины в сверхрешетке известны. Проведенный анализ показывает, что предполагаемый слой  $CdTe$  на самом деле представляет собой сплав  $Cd_{0,91}Hg_{0,09}Te$ . Этот факт не противоречит условиям осаждения  $CdTe$ , т.к. в процессе МЛЭ роста источник  $Hg$  все время остается открытым [22]. Отсутствие в спектрах отражения мод  $\omega_3^H$  и  $\omega_2^H$  решеточных колебаний  $Hg-Te$ , соответствующих базисным ячейкам  $Cd(1)Hg(3)Te$  и  $Cd(2)Hg(2)Te$ , является доказательством того, что в сверхрешетке присутствуют только слои чистого  $HgTe$  и практически отсутствуют межслоевые области переменного состава между слоями  $HgTe$  и  $Cd_{0,91}Hg_{0,09}Te$ . Эти результаты доказывают принципиальную возможность получения для случая  $CdTe-HgTe$  сверхрешетки с резкими слоями.

Т а б л и ц а 2

Параметры решеточных осцилляторов, которые использовались для подгонки модульной диэлектрической функции  $\epsilon_{SL}''$  структуры ВМССТ1

$\omega_{ij}, \text{ см}^{-1}$	106	115	118,5	129	136	146,5	148,5
$S_j$	0,5	1,0	0,6	0,4	0,3	1,2	0,3
$\Gamma_j, \text{ см}^{-1}$	15	5,0	3,0	5,0	8,0	4,0	7,0

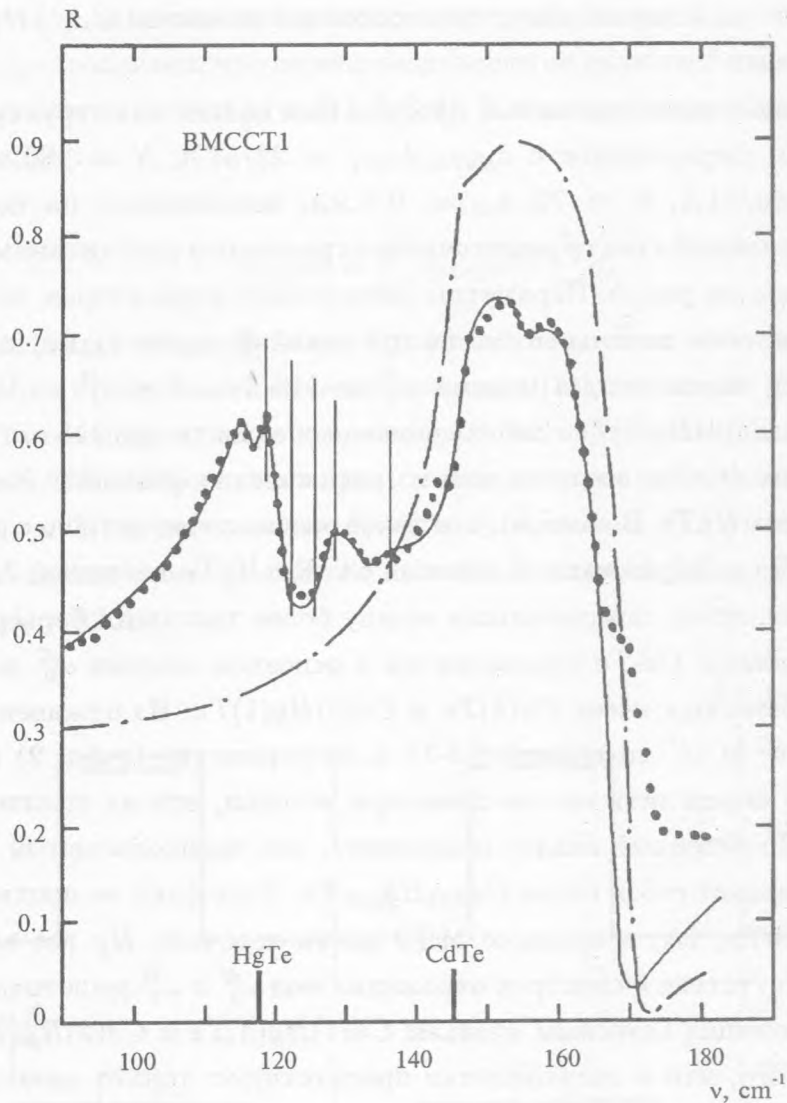


Рис. 5. Решеточный спектр отражения  $R$  сверхрешетки ВМССТ1 (темные кружки – экспериментальный спектр, сплошная кривая – рассчитанный спектр) при 6 К и рассчитанный спектр отражения подложки при 6 К (штрих-пунктирная кривая).

Для демонстрации возможности ДИК спектроскопии обнаруживать и характеризовать области сплава в сверхрешетках  $HgTe-CdTe$  мы провели следующее сравнение. Экспериментальный спектр отражения сверхрешетки  $SL3P$ , для которой предполагаемое отношение молярных концентраций равно 70/35, сравнивался с ожидаемым спектром для случая, когда сверхрешетка заменена однородным слоем сплава  $Cd_{0,29}Hg_{0,71}Te$



приблизительно с таким же отношением молярных компонент и с такой же толщиной (1,8 мм). Это различие демонстрируется на рис. 3, где представлены спектры следующих структур: "сплав на подложке", идеальная (без границы раздела)  $HgTe-CdTe$  "сверхрешетка на подложке" и реальная сверхрешетка  $SL3P$  с равным молярным содержанием компонент  $HgTe$  и  $CdTe$  в сплаве и в сверхрешетке и с равными толщинами. Видно, что эти спектры сильно различаются, что является наглядной демонстрацией чувствительности метода ИК отражательной спектроскопии.

*Заключение.* Данные по инфракрасному отражению позволили получить ценную информацию о составе и ширине границы раздела сверхрешеток  $HgTe-CdTe$ . Сочетание фундаментальных и характеристических данных, которые могут быть получены из этих измерений, демонстрирует универсальность ИК метода. Для объяснения поведения фононных мод, включающего эффекты сегрегации, для сверхрешеток и сплавов  $HgTe-CdTe$  была применена модель, основанная на пяти базисных ячейках. Сравнение сил осцилляторов сверхрешеток  $HgTe-CdTe$ , полученных из ДИК спектров, с силами мод объемных сплавов позволило нам определить присутствие сплава на границе раздела и ее ширину. Среди исследуемых образцов обнаружена структура с резкими слоями и практическим отсутствием сплава на границе раздела.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект N 97-02-16791.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Levine B. P. Intersub. Trans. Quant. Wells. Ed. E. Rosencher, Plenum Press, N. Y., 1992, p. 43.
- [2] Schulman J. N. and McGill T. C. Appl. Phys. Lett., **34**, 663 (1979).
- [3] Faurie J. P., Sivananthan S., and Reno J. J. Vac. Sci. Technol., A, **4**, 2096 (1986).
- [4] Jusserand B., Alexandre F., Pacquet D., and LeRoux G. Appl. Phys. Lett., **47**, 301 (1985).
- [5] Fasol G., Tanaka M., Sakaki H., and Horikoshi Y. Phys. Rev., B **38**, 6065 (1988).
- [6] Wicks G. W., Bradshaw J. T., and Radulescu D. C. Appl. Phys. Lett., **52**, 570 (1988).
- [7] Baroni S., Giannozzi P., and Molinari E. Phys. Rev., B **41**, 3870 (1990).

- [8] Warwick C. A., Jan W. Y., Ourmazd A., and Harris T. D. Appl. Phys. Lett., **56**, 2666 (1990).
- [9] Gammon D., Shaabrook B. V., and Katzer D. S. Appl. Phys. Lett., **56**, 2710 (1990).
- [10] Jusserand B., Mollet F., Moison J. M., and LeRoux G. Appl. Phys. Lett., **57**, 560 (1990).
- [11] Samson B., Dumelow T., Hamelton A. A. et al. Phys. Rev., **B 46**, 2375 (1992).
- [12] Perkowski S., Rajavel D., Sow I. K. et al. Appl. Phys. Lett., **49**, 806 (1986).
- [13] Perkowski S., Sudharsanan R., and Yom S. S. J. Vac. Sci. Technol., **A 5**, 3157 (1987).
- [14] Козырев С. П., Пырков В. Н., Водопьянов Л. К. ФТТ, **34**, N 12, 3695 (1992).
- [15] Chang I. P. and Mitra S. S. Adv. Phys., **20**, 359 (1971).
- [16] Mayanovic R. A., Pong W. P., and Bunker B. A. Phys. Rev., **B 42**, 11174 (1990).
- [17] Zax D. B., Vega S., Yellin N., and Zamir D. Chem. Phys. Lett., **138**, 105 (1987).
- [18] Agranovich V. M. and Kravtsov V. E. Solid St. Commun., **55**, 85 (1985).
- [19] Heavens O. S. Optical Properties of Thin Solid Films. Dover, N. Y., 1965.
- [20] Водопьянов Л. К. and Козырев С. П. Phys. Stat. Sol. (a), **72**, 737 (1982).
- [21] Grynberg M., LeToullec R., and Balkanski M. Phys. Rev., **B 9**, 517 (1974).
- [22] Harris K. A., Hwang S., Blanks D. K. et al. Appl. Phys. Lett., **48**, 396 (1986).

Поступила в редакцию 27 августа 1997 г.