

**ФИЗИЧЕСКИЕ И ТЕХНИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ  
МИКРО- И ОПТОЭЛЕКТРОНИКИ**

УДК 621.315.592

**А. Б. Талочкин, А. В. Ефанов, В. А. Марков,  
А. И. Никифоров, С. А. Тийс***(Новосибирск)***РАМАНОВСКИЙ РЕЗОНАНС  
В НАПРЯЖЕННЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ ГЕРМАНИЯ**

Исследовано рамановское рассеяние света на оптических фононах в Si/Ge/Si-структурах с квантовыми точками Ge в области  $E_0$ -резонанса при различных температурах. Показано, что положение  $E_0$ -резонанса определяется энергией  $\Gamma_2$  электронного состояния квантовых точек. Наблюдение усиления интенсивности рассеяния в условиях двойного резонанса позволило оценить параметр затухания  $\Gamma_2$  электронного состояния и получить дополнительную информацию об электронных состояниях границы раздела Ge-Si и о дырочных уровнях квантовых точек Ge. По частотам наблюдаемых фононных мод установлено, что в псевдоморфных квантовых точках Ge в Si-матрице происходит смена знака компонент тензора деформации.

**Введение.** Получение и исследование полупроводниковых квантовых точек вызывает большой интерес в последние годы. Это связано с новыми физическими свойствами данных систем, которые не проявляются в случаях более высокой размерности [1, 2]. Интенсивно исследуются квантовые точки, полученные в структурах InAs-GaAs, InSb-GaAs, Ge-Si с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) [3, 4]. В данных системах обычно наблюдаются электронные (дырочные) состояния, локализованные в потенциальных ямах, возникающих из-за разрыва зон (валентной или проводимости) материалов квантовых точек и матрицы. Эти состояния изучались с помощью фотолюминесценции [1, 4] и туннельной проводимости [5], их спектр хорошо описывается с помощью нескольких типов потенциалов локализации носителей [6]. Как показано в [7], электронные уровни квантовых точек Ge, находящиеся по энергии в полосе собственного спектра Si-матрицы, также могут образовывать локализованные состояния. Их появление не столь очевидно, как в предыдущем случае, и природа локализации такого типа нуждается в дополнительных исследованиях.

Данная работа посвящена исследованию спектров электронных состояний квантовых точек Ge с помощью комбинационного рассеяния света (КРС) на оптических фононах. По своей природе длинноволновые оптические фононы, наблюдаемые в спектрах КРС, сильно локализованы. Это обстоятельство позволяет использовать резонансное КРС для изучения локализован-

ных электронных состояний. Наблюдалось изменение энергии  $E_0$ -резонанса в зависимости от размера квантовых точек. Показано, что этот сдвиг определяется энергией  $\Gamma_2$  электронного состояния. Наблюдаемое усиление интенсивности рассеяния в условиях двойного резонанса позволило оценить параметр затухания этого состояния и получить дополнительную информацию об электронных состояниях границы раздела Ge-Si и о дырочных уровнях квантовых точек Ge. Анализ наблюдаемого квазистационарного электронного состояния, проведенный в сферически-симметричной модели с учетом особенностей электронного спектра Si-матрицы, позволил установить характер локализации состояния данного типа.

**1. Получение Si/Ge/Si-структур с квантовыми точками.** В результате значительной разницы постоянных решеток Ge и Si ( $\Delta a = 4\%$ ) псевдоморфный двумерный рост Ge на Si при МЛЭ сохраняется до критической толщины пленки германия  $h_{cr}$ . По достижении значения  $h_{cr}$  происходят образование и самосогласованный рост трехмерных островков (квантовых точек) по механизму Странского – Крастанова [8]. На первом этапе морфологической перестройки образуются псевдоморфные островки германия – так называемые хат-кластеры [8, 9]. Кластеры имеют форму четырехгранных пирамид с ориентацией граней типа (105) [9]. В них отсутствуют дислокации несоответствия и релаксация упругих напряжений осуществляется за счет упругой деформации [10]. При толщине пленки более 8–12 моноатомных слоев (ml) образуются трехмерные островки с дислокациями несоответствия и ограникой типа (113) [8]. Обычно квантовые точки Ge получают при температурах подложки Si  $T_s = 773$ – $973$  К, для которых  $h_{cr}$  составляет 2–4 ml и характерный размер срелаксированных островков в плоскости подложки  $\sim 1000$  Å [4]. В данной работе получены квантовые точки Ge в псевдоморфном состоянии существенно меньших размеров ( $\sim 100$  Å). Это достигалось понижением температуры роста  $T_s$  до 473–423 К. С понижением  $T_s$  возрастает  $h_{cr}$  (в нашем случае до 10–15 ml) и резко уменьшается диффузионная длина адатомов германия, что обеспечивает образование трехмерных псевдоморфных островков Ge на начальных стадиях роста.

Исследованные Si/Ge/Si-структуры выращивались в установке МЛЭ на подложках кремния КЭФ-5 (001). После предварительной химической обработки подложки помещались в ростовую камеру, где проводилась их очистка при температуре 1073 К в слабом потоке кремния в течение 15 мин. В результате очистки образуется атомарно-чистая поверхность со сверхструктурой ( $2 \times 1$ ). Затем выращивался буферный слой кремния толщиной 1000 Å. Потоки Si и Ge создавались электронно-лучевыми испарителями, обеспечивающими характерную скорость роста 0,1 Å/мин. В процессе роста Ge наблюдалось четыре осцилляции нулевого порядка дифракции быстрых электронов, которые при дальнейшем увеличении толщины быстро затухали. После нанесения германия структура покрывалась слоем Si толщиной 500 Å.

Полученные образцы представляли собой ступенчатые структуры с различной эффективной толщиной Ge, что достигалось с помощью заслонки, вводимой в поток Ge в процессе роста. Схемы данных структур показаны на рис. 1, *a–e*. Для области *a* наблюдается двумерный механизм роста в диапазоне толщин 0–4 ml. При эффективной толщине 4–5 ml возникает трехмерный рост изолированных островков Ge (области *b, c* на рис. 1). При толщине 12 ml островки смыкаются в сплошной слой (область *d*), а, начиная с 15 ml, релаксация упругих напряжений Ge происходит за счет введения дислока-

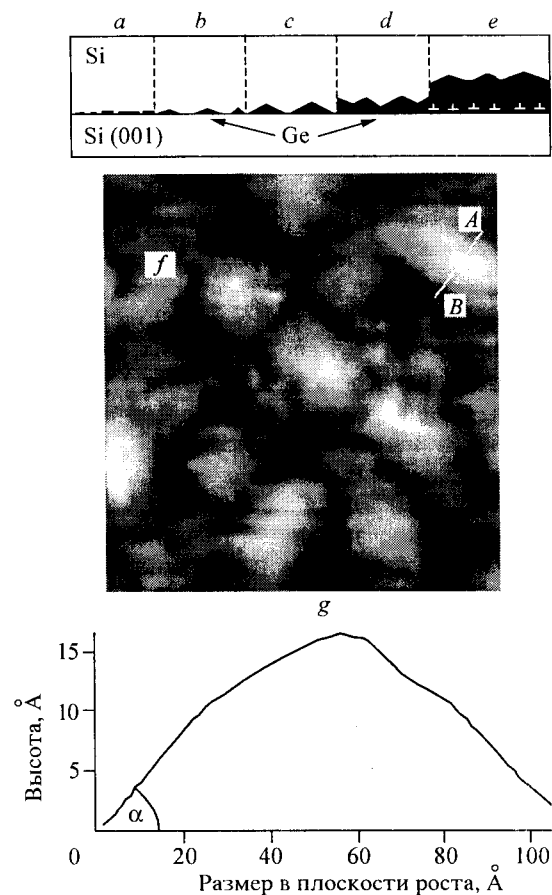


Рис. 1. Схема Si/Ge/Si-структуры с квантовыми точками Ge. Области с различной эффективной толщиной слоя Ge: *a*–0–4, *b*, *c*–5–10, *d*–12, *e*–15 ml; *f*–СТМ-изображение поверхности ( $500 \times 500 \text{ \AA}$ ) образца с квантовыми точками Ge; *g*–поперечный профиль, полученный вдоль линии *A–B*

ций несоответствия (область *e*). Толщина Ge изменялась в диапазоне 0–40 ml с шагом 0,5–2 ml для малых толщин и 10 ml для больших (>20 ml). Размеры и форма квантовых точек измерялись с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) фирмы "RIBER-OMICRON" на образцах, которые специально не покрывались слоем Si. На рис. 1, *f* показано СТМ-изображение площади ( $500 \times 500 \text{ \AA}$ ) образца с эффективной толщиной Ge 8 ml, полученное при туннельном токе 0,2 нА. На рис. 1, *g* приведен профиль, измеренный вдоль линии *A–B*. Видно, что характерная высота квантовых точек Ge составляет 15 Å, а размер основания пирамиды в плоскости роста около 100 Å. Угол  $\alpha$  между основанием и боковыми гранями составляет  $17^\circ$ .

**2. Рамановское рассеяние света на оптических фононах квантовых точек Ge.** Спектры КРС на оптических фононах возбуждались линиями Ar-лазера при температурах 300, 77 и 4 К и регистрировались с помощью спектрометра ДФС-52. На рис. 2 представлены спектры КРС Si/Ge/Si-структур с различной эффективной толщиной слоя германия ( $T_s = 473 \text{ K}$ ):  $h = 6, 8, 12$  и 20 ml. В спектрах наблюдаются линии рассеяния на оптических фононах

Ge ( $316 \text{ см}^{-1}$ ) и Si ( $520 \text{ см}^{-1}$ ), а также линия колебаний связей Ge-Si ( $420 \text{ см}^{-1}$ ), образованных на границе раздела. Частота оптического фонона Ge линейно зависит от деформации. Объемное значение показано на рис. 2 стрелкой. Наблюдаемый сдвиг частоты оптического фонона относительно объемного значения ( $16 \text{ см}^{-1}$ ) соответствует двуслойной деформации германия, равной 4 %. Германий находится в псевдоморфном состоянии в слоях толщиной 6, 8 и 12 ml (рис. 2, *b-d*). Начиная с 15 ml, наблюдается релаксация, т. е. фононная линия смещается в низкочастотную область, а при 20 ml в спектре (рис. 2, *a*) проявляется линия частично релаксированного германия и псевдоморфная фаза уже отсутствует. Из рис. 2 видно, что интенсивность рассеяния резко зависит от эффективной толщины, в то время как механические напряжения Ge не изменяются. Эти особенности обусловлены изменением электронного спектра в зависимости от размера квантовых точек.

Были исследованы резонансные зависимости КРС на оптических фонах с использованием дискретных линий Ar-лазера в диапазоне энергий возбуждающего света 2,4–2,6 эВ. Эти зависимости представлены на рис. 3 для образцов Si/Ge/Si-структур с эффективной толщиной Ge 8, 6 и 12 ml. Сплошные кривые проведены через экспериментальные точки. Видно, что зависимости, полученные для образцов с квантовыми точками *a* и *b*, имеют резонансный характер. Максимум для одного образца наблюдается при  $\hbar\omega = 2,5 \text{ эВ}$ , для другого – сдвинут в высокочастотную область. Для образца *c* квантовые точки смыкаются в сплошной слой германия и резонансная зависимость в области 2,4–2,6 эВ проявляет характерный спад, соответствующий пику при  $\hbar\omega < 2,4 \text{ эВ}$ .

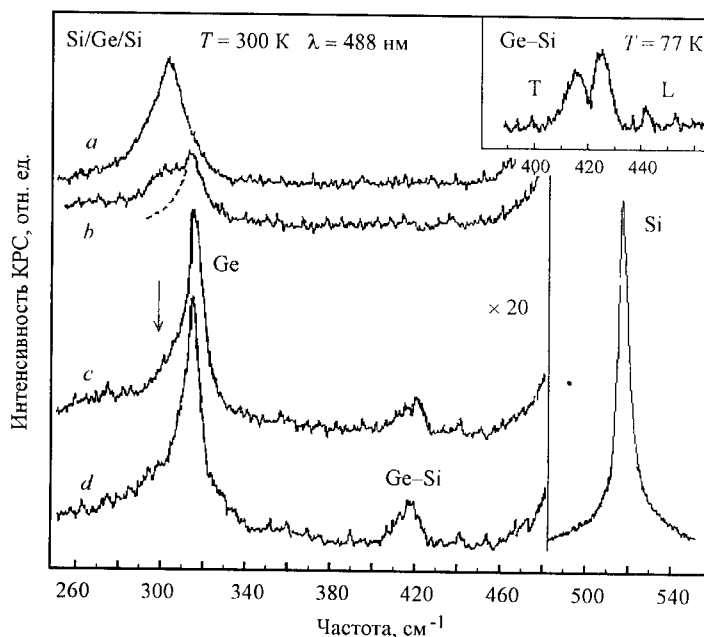


Рис. 2. Спектры КРС на оптических фонах в Si/Ge/Si-структурах с различной эффективной толщиной Ge: *a*–20, *b*–12, *c*–8, *d*–6 ml; на вставке показана подробная форма линии Ge-Si КРС, измеренной при  $T = 77 \text{ К}$

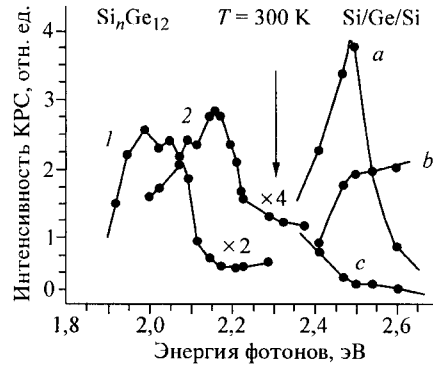


Рис. 3. Резонансные зависимости КРС на оптических фонах Si/Ge/Si-структур с различной эффективной толщиной слоя Ge: *a*–8, *b*–6, *c*–12 мн; 1, 2–резонансные зависимости КРС на оптических фонах Ge, полученные от сверхрешеток Si<sub>*n*</sub>Ge<sub>12</sub> в [11], 1 – *n* = 4, 2 – *n* = 12

На рис. 3 приведены также резонансные зависимости для оптических фононов германия, полученные от сверхрешеток Si<sub>*n*</sub>Ge<sub>12</sub> (кривая 1 – *n* = 4, кривая 2 – *n* = 12) в работе [11]. Первый образец имеет ненапряженные слои германия, деформация Ge во втором образце составляет 2 %. В [11] показано, что наблюдаемый резонанс связан с  $E_0$ -краем (прямыми переходами из валентной зоны ( $\Gamma_{25}$ ) в зону проводимости ( $\Gamma_2$ )), причем электронные (дырочные) состояния локализованы в слоях германия. Энергия  $E_0$ -края в объемном Ge составляет 0,9 эВ, в двумерном случае энергия состояния  $\Gamma_2$  растет из-за квантования движения электронов вдоль оси сверхрешетки и составляет 2,0 эВ (кривая 1 на рис. 3). Вклад в изменение  $E_0$ -края дает в основном сдвиг электронного состояния ( $\Gamma_2$ ), смещение же дырочных уровней примерно на порядок меньше из-за разницы эффективных масс электронов и дырок ( $m_e = 0,04m_0, m_h = 0,37m_0$ , где  $m_0$  – масса свободного электрона). В результате деформации в 2 %  $E_0$ -край сдвигается на 0,15 эВ (кривая 2 на рис. 3). Тем самым положение  $E_0$ -резонанса в двумерном случае псевдоморфного Ge (деформация 4 %) должно быть 2,3 эВ. Это положение отмечено на рисунке стрелкой. В результате энергетический сдвиг состояния  $\Gamma_2$ , возникающий из-за квантования движения в плоскости роста (т. е. образования квантовых точек), по сравнению с двумерным случаем составляет 0,25–0,3 эВ.

Применение простейшей модели локализации электронного состояния квантовой точки – «ящик с бесконечными стенками» – позволяет определить характерный размер квантовых точек по наблюдаемому сдвигу  $E_0$ -резонанса [7]. Система энергетических уровней частицы массой  $m$  в этой модели определяется выражением

$$E = E^{2D} + E^{0D} = (\pi^2 \hbar^2 / 2m)(n_1 / d_z)^2 + (\pi^2 \hbar^2 / 2m)[(n_2 / d_x)^2 + (n_3 / d_y)^2], \quad (1)$$

где  $n_1, n_2, n_3$  – целые числа;  $d_z, d_x, d_y$  – размеры по осям  $z$  (по направлению роста) и в плоскости роста ( $x, y$ ). Для основного состояния  $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ . Первый член определяет сдвиг энергии при переходе от объемного состояния к двумерному (2D), второй – от двумерного к нульмерному (0D). Согласно (1) наблюдаемый сдвиг  $E^{0D} = 0,25–0,3$  эВ для образца *a* (см. рис. 3) соответствует  $d_x \sim d_y = 80–90$  Å при  $d_z = 30$  Å. Это значение хорошо согласо-

ется с данными СТМ [12]. Для второго набора квантовых точек (образец *b* на рис. 3)  $d_x \sim d_y = 70 \text{ \AA}$ .

Как видно из рис. 2, в спектрах структур с квантовыми точками 6–10 ml наблюдается пик ( $420 \text{ см}^{-1}$ ), связанный с колебаниями связей Ge–Si, образованных на границе раздела Ge с Si-матрицей. Такого типа колебания присутствуют в спектрах КРС твердых растворов Ge : Si и сверхрешеток Ge/Si [13]. Значение частоты и форма линии Ge–Si характеризуют состояние границы раздела. Теоретический анализ, проведенный в [13], дает значение частоты этой моды для псевдоморфного Ge и идеально резкой границы  $420 \text{ см}^{-1}$ , в этом случае должно также проявляться расщепление между продольными (L) и поперечными (T) колебаниями  $6\text{--}10 \text{ см}^{-1}$ . Введение в расчеты взаимного перемешивания Ge и Si на уровне 2 ml приводило к тому, что частоты L- и T-колебаний оказывались равными; это и наблюдалось в эксперименте [13].

На вставке рис. 2 приведена подробная форма пика Ge–Si, полученного при  $T = 77 \text{ К}$  [12, 14]. Видно, что он имеет дублетную структуру, которая связана с различием частот L- и T-колебаний Ge–Si. Таким образом, наблюдаемое значение частоты колебаний Ge–Si и L- и T-расщепление согласуются с результатами теоретического анализа [13], что свидетельствует о резкости границы раздела квантовых точек Ge с Si-матрицей. В Si/Ge/Si-структурах, в которых квантовые точки смыкаются в сплошной слой, интенсивность линии Ge–Si, так же как и фононного пика Ge (см. рис. 3, образец *c*), падает и не проявляется в спектрах КРС. В результате наблюдается не только резонансное усиление пика Ge в области  $E_0$ -резонанса квантовых точек [7], но и моды Ge–Si.

**3. Спектр электронных состояний квантовых точек Ge.** Дополнительные возможности КРС по исследованию электронных состояний квантовых точек обнаружены в экспериментах, проводимых при низких температурах. На рис. 4, *a, b* представлены резонансные зависимости КРС на оптических фононах квантовых точек Ge, измеренные с линиями Ar-лазера для двух образцов при  $T = 300$  и  $77 \text{ К}$ . Образцы различаются размером квантовых точек: 9 и 5 ml. На рис. 4, *c* приведены резонансные зависимости моды Ge–Si образца *a*, полученные при двух значениях температуры.

Из рис. 4, *a, b* видно, что экспериментальные точки (кривая 3), полученные при  $T = 300 \text{ К}$ , ложатся на плавные кривые и не имеют резких особенностей. С понижением температуры до  $77 \text{ К}$  резонансная зависимость образца *a* существенно меняется. Наблюдается рост интенсивности КРС в 3–4 раза для  $\hbar\omega = 2,55, 2,61 \text{ эВ}$ , что является необычным и отражает нульмерный характер данного резонанса. Для  $E_0$ -резонанса в объемном Ge и в сверхрешетках Ge/Si наблюдается температурный сдвиг ( $\sim 45 \text{ мэВ}$ ) без изменения амплитуды [11, 15]. Несмотря на то, что имеющихся в нашем распоряжении лазерных линий недостаточно для подробного исследования формы резонанса, обнаруженный «аномальный» рост интенсивности КРС позволяет провести оценку параметра затухания электронного состояния  $\Gamma_2$  и выявить особенности спектра дырочных уровней квантовых точек.

Резонансную зависимость образца *a* (см. рис. 4) можно представить в виде пиков 1 (сплошная линия) и 2 (штриховая). Амплитуда низкочастотного пика 1 значительно слабее зависит от температуры, чем интенсивность высокочастотного пика 2. С понижением температуры до  $4 \text{ К}$  существенных изменений интенсивности и формы зависимостей не происходит. Обнаруженная

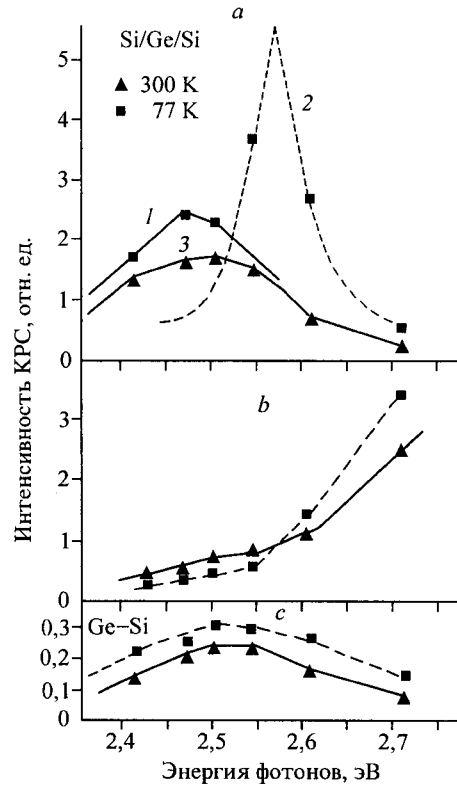
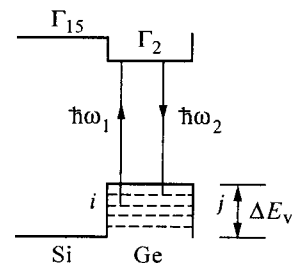


Рис. 4. Резонансные зависимости КРС на оптических фонах квантовых точек Ge, измеренные для двух образцов при  $T = 300$  и  $77$  К (a, b), а также резонансные зависимости моды Ge-Si (c): a -  $h = 9$ , b -  $h = 5$  ml

дублетная структура наблюдается на всех образцах ( $7 < h < 9$  ml) с разным соотношением амплитуд пиков. Это, как показано ниже, определяется распределением квантовых точек по размерам.

Рассмотрим электронные состояния квантовых точек Ge, которые определяют интенсивность КРС. На рис. 5 показаны положения уровней квантовых точек относительно состояний Si-матрицы. Разрыв потолка валентных зон Si и псевдоморфного Ge составляет  $\Delta E_v = 0,5$  эВ [6]. Штриховыми линиями показаны дырочные уровни, образованные из объемных состояний  $\Gamma_{25}$  Ge (зона тяжелых дырок). Уровни, происходящие из зоны легких дырок Ge, из-за напряжений [16] и пространственного квантования опускаются ниже уровня Si. Состояние  $\Gamma_2$  находится в области непрерывного спектра Si на  $0,1-0,2$  эВ ниже уровня  $\Gamma_{15}$ . Переходы, которые дают вклад в КРС, показаны на рис. 5 вертикальными линиями, причем уровни  $i$  и  $j$  смешиваются деформационным потенциалом оптического

Рис. 5. Схема энергетических уровней квантовых точек Ge относительно электронных состояний Si-матрицы: стрелками показаны переходы, которые дают вклад в КРС на оптических фонах квантовых точек



фонона. Через  $\omega_1$  и  $\omega_2$  обозначены частоты возбуждающего и рассеянного света, различающиеся на частоту фонона  $\Omega$  ( $\omega_1 = \omega_2 + \Omega$ ). Зависимость интенсивности КРС от частоты  $\omega_1$  описывается выражением [17]

$$I(\omega_1) = A \left| \sum_{i,j} \frac{P_i P_j D_{ij}}{(\omega_1 - \omega_i + i\Gamma)(\omega_2 - \omega_j + i\Gamma)} \right|^2, \quad (2)$$

где  $A$  – константа;  $\hbar\omega_i$ ,  $\hbar\omega_j$ ,  $P_i$ ,  $P_j$  – энергии и матричные элементы оператора импульса прямых переходов  $(i, j) \rightarrow \Gamma_2$ ;  $D_{ij}$  – константа деформационного потенциала;  $\Gamma$  – параметр уширения промежуточного состояния ( $\Gamma_2$ ).

Обычно считается, что величины, стоящие в числителе (2), не зависят от частоты  $\omega_1$ . Из выражения (1) видно, что основной вклад в КРС дают переходы, для которых  $P_i, P_j \neq 0$ . Матричные элементы  $P_i, P_j$  определяются перекрытием волновых функций дырочных состояний с волновой функцией уровня  $\Gamma_2$  квантовых точек [6]. В работе [6] рассчитаны волновые функции дырочных состояний квантовых точек InAs пирамидальной формы. Эта ситуация близка к нашему случаю по форме островков, разрыву зон и напряженному состоянию [9]. Показано, что из всего набора дырочных состояний только два ближайших к потолку валентной зоны ((000) и (001) в обозначениях [6]) имеют отличное от нуля перекрытие с основным электронным состоянием. В нашем случае эти два состояния дают основной вклад в КРС. Следовательно, в сумме (2) остается один член и отдельная квантовая точка имеет достаточно узкий контур резонансной зависимости (не более 40 мэВ), а наблюдаемые зависимости (см. рис. 4) уширены из-за распределения квантовых точек по размерам. Из зависимости энергии состояния  $\Gamma_2$  от размера, которая получается в модели «ящик с бесконечными стенками», можно оценить полуширину функции распределения островков Ge по размерам в плоскости роста для образцов  $a$  и  $b$  (см. рис. 4) Ее значение составляет 15–20 Å.

Обнаруженные особенности резонансных зависимостей (см. рис. 4,  $a$ ) обусловлены распределением квантовых точек по размерам и уменьшением  $\Gamma$  с понижением температуры. Из выражения (2) следует, что при достаточно больших значениях  $\Gamma \sim \Omega$  амплитуда резонанса слабо зависит от  $\omega_i - \omega_j$ , т. е. квантовые точки с различной энергией расщепления дырочных состояний имеют близкую интенсивность КРС в резонансе. В этом случае резонансная зависимость «повторяет» распределение точек по размерам, что наблюдается при  $T = 300$  К (см. рис. 4,  $a, b$ ). При  $\Gamma \ll \Omega$  зависимость амплитуды от  $\omega_i - \omega_j$  резко усиливается. Квантовые точки, для которых выполняется условие двойного резонанса  $\hbar(\omega_i - \omega_j) = \hbar\Omega = 40$  мэВ, имеют максимальную интенсивность КРС, поскольку оба резонансных знаменателя в выражении (2) одновременно принимают минимальное значение. Резонансная зависимость для такого типа квантовых точек наблюдается в образце  $a$  при  $T = 77$  К в виде интенсивного пика 2 на рис. 4. Соотношение амплитуд пиков 1 и 2 на рис. 4,  $a$  определяется распределением островков по размерам, и с уменьшением эффективной толщины Ge интенсивность пика 2 падает, а при  $h = 5,5$  нм он уже отсутствует. В точках с несколько меньшей (см. рис. 4,  $a$ , пик 1) и большей (см. рис. 4,  $b$ ) энергией расщепления дырочных состояний по сравнению с энергией оптического фонона наблюдается не столь значительный рост амплитуды КРС резонанса при  $T = 77$  К. Используя выражение (2) и наблюдаемые изменения интенсивности КРС в условиях двойного резонанса, можно



определить значения параметра уширения  $\Gamma$ . При  $T = 300\text{ К}$   $\Gamma = (0,3 - 0,5)\hbar\Omega = 12 - 20$  мэВ, а при  $T = 77\text{ К}$   $\Gamma = (0,1 - 0,2)\hbar\Omega = 4 - 8$  мэВ. Неопределенность в  $\Gamma$  связана с некоторым произволом в нахождении амплитуды двойного резонанса.

Отметим, что зависимость параметра уширения  $\Gamma$  от температуры может возникать из-за роста вероятности распада состояния  $\Gamma_2$  квантовых точек Ge на состояния Si-матрицы в результате взаимодействия с равновесными фононами (температурное уширение). Кроме того, резонансные зависимости для колебаний Ge-Si (см. рис. 4, *c*) не повторяют форму и температурное поведение резонанса оптического фонона квантовых точек Ge (см. рис. 4, *a*). Это обусловлено тем, что резонанс моды Ge-Si происходит за счет электронных переходов между дырочными состояниями границы раздела и уровнем  $\Gamma_2$  квантовых точек, поскольку амплитуда волновой функции состояния  $\Gamma_2$  не обращается в нуль на границе раздела Ge-Si. Дырочные же состояния квантовых точек из-за более сильной локализации в глубокой потенциальной яме имеют незначительное перекрытие с гетерограницей [6].

**4. Локализация электронного состояния  $\Gamma_2$  квантовых точек.** Экспериментально определенное значение параметра уширения  $\Gamma$  состояния  $\Gamma_2$  квантовых точек Ge существенно меньше сдвига по энергии, возникающего в результате пространственного квантования ( $\sim 1,3$  эВ). Это свидетельствует о достаточно сильной локализации с хорошо определенным уровнем энергии. Параметр уширения такого типа квазистационарного состояния определяется вероятностью распада на состояния непрерывного спектра Si-матрицы. В качестве основного канала распада может быть переход в состояние вблизи точки  $\Gamma_{15}$  зоны проводимости Si. Состояние  $\Gamma_{15}$  Si при волновом векторе  $k = 0$  является вырожденным. При  $k \neq 0$  существует две ветви с положительной и отрицательной эффективной массой. Уровень  $\Gamma_2$  квантовых точек находится на  $0,1 - 0,2$  эВ ниже состояния  $\Gamma_{15}$  Si и может распадаться на состояния нижней ветви с  $m_2 < 0$ . Эффективная масса состояния  $\Gamma_2$  Ge  $m_1 = 0,04m_0$ , а для нижней ветви состояния  $\Gamma_{15}$  Si  $|m_2| = 3m_0$ .

Найдем энергию основного электронного состояния и его затухание для сферически-симметричной квантовой точки радиуса  $a$  в приближении огйбающих волновых функций. Волновые функции основного электронного состояния внутри и вне квантовой точки можно записать в виде

$$\psi_1 = A \frac{\sin k_1 r}{r}, \quad \psi_2 = B \frac{\exp(-ik_2 r)}{r}, \quad (3)$$

где  $\hbar k_1 = (2m_1 E)^{1/2}$ ,  $\hbar k_2 = [2|m_2|(U_0 - E)]^{1/2}$ ,  $E$  – энергия, отсчитанная от дна зоны  $\Gamma_2$  псевдоморфного Ge,  $U_0$  – разность энергий состояния  $\Gamma_{15}$  Si и уровня  $\Gamma_2$  псевдоморфного Ge. Волновые векторы  $k_1$  и  $k_2$  отвечают электронным состояниям одинаковой энергии внутри квантовой точки и снаружи. Из условия непрерывности волновых функций и их производных при  $r = a$

$$\psi_1 = \psi_2, \quad \frac{1}{m_1} \frac{d\psi_1}{dr} = \frac{1}{m_2} \frac{d\psi_2}{dr} \quad (4)$$

получается дисперсионное уравнение

$$(k_1 a) \text{ctg}(k_1 a) = 1 - \frac{m_1}{m_2} - i \frac{m_1}{m_2} (k_2 a), \quad (5)$$

из которого находятся энергия и параметр уширения электронного уровня  $E = E_0 - i\Gamma$ . Мнимая часть в (5) определяет затухание  $\Gamma$ . Для квантовых точек, уровень энергии которых  $E_0$  расположен не слишком далеко от состояния  $\Gamma_{15}$  Si, при условии, что  $(m_1/m_2)(k_2a) \ll 1$ , обеспечивается малое затухание  $\Gamma$ . В этом случае энергия уровня  $E_0$  определяется приближенно из уравнения  $(k_1a)\text{ctg}(k_1a) = 1$ , соответствующего граничному условию  $d\psi_1/dr = 0$  при  $r = a$ . Относительное затухание оказывается равным

$$\frac{\Gamma}{E_0} = \frac{2m_1}{|m_2|} \frac{k_2a}{(k_1a)^2}. \quad (6)$$

Для  $E_0 = 1,3$  эВ и  $a = 35 \text{ \AA}$   $\Gamma/E_0 = 0,018$ , что соответствует  $\Gamma = 23$  мэВ. В результате рассмотренная модель разумно согласуется с экспериментом и позволяет понять природу локализации состояния  $\Gamma_2$  квантовых точек Ge. Его распад на состояния  $\Gamma_{15}$  Si затруднен в силу значительной разницы эффективных масс  $(m_1/m_2) \sim 0,01$ .

Отметим, что эта модель дает характерный размер квантовых точек ( $2a = 70 \text{ \AA}$ ), незначительно отличающийся от размера, полученного в модели «ящик с бесконечными стенками» ( $d_x \sim d_y = 80-90 \text{ \AA}$ ,  $d_z = 30 \text{ \AA}$ ) по наблюдаемому сдвигу  $s(\Gamma_2)$  состояния. В то же время локализация такого типа в предельном случае ( $m_2 \rightarrow \infty$ ) приводит к существенным различиям граничных условий на волновые функции. На границе раздела должна обращаться в нуль не амплитуда огибающей волновой функции, как в модели «ящик с бесконечными стенками», а ее производная. Это существенно влияет на энергию некоторых уровней. Так, энергия  $p$ -состояния квантовых точек оказывается ниже (на 1 эВ) рассмотренного  $s$ -уровня. При заданных значениях параметров оно эффективно распадается на состояния Si-матрицы и имеет уширение, сравнимое с его энергией. Кроме того, отличие от нуля амплитуды волновой функции на границе для рассмотренного типа локализации позволяет объяснить резонансное усиление интенсивности КРС на колебаниях Ge-Si границы раздела.

**5. Деформации псевдоморфных квантовых точек германия.** Как отмечалось выше, квантовые точки (КТ), полученные с помощью МЛЭ, сильно напряжены, поскольку псевдоморфная пленка сохраняет параметр решетки материала подложки в плоскости роста. Деформация КТ InAs, выращенных в GaAs, достигает 7 % [1], а КТ Ge в Si – 4 % [9]. Столь высокие значения деформации приводят к сильным сдвигам спектра электронных состояний КТ, а также к изменению других параметров [6]. Теоретические расчеты [6], проведенные для КТ InAs-GaAs, предсказывают неоднородное распределение деформации в КТ. В результате действия двух силовых составляющих – со стороны подложки и покрывающей КТ матрицы – величина деформации зависит от расстояния до основания КТ и на некоторой высоте обращается в нуль, и меняет знак [6]. С целью изучения деформации КТ нами исследован спектр оптических фононов КТ Ge, полученных с помощью МЛЭ в Si-матрице [18]. В данной системе (Ge-Si) оптические фононы сильно локализованы, а их частота линейно зависит от деформации, это позволило по наблюдаемым частотным сдвигам восстановить деформационное состояние КТ Ge.

На рис. 6 приведены спектры, измеренные в геометрии обратного рассеяния на образце с эффективной толщиной слоя Ge, равной 8 нм, при  $T = 300$  К.

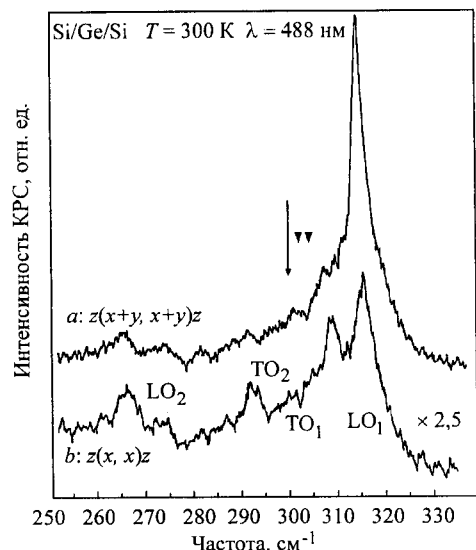


Рис. 6. Спектры КРС на оптических фононах квантовых точек Ge, полученные при  $T = 300\text{ K}$  с  $\lambda = 488\text{ нм}$  в двух поляризационных геометриях: стрелкой обозначено положение частоты объемного фонона Ge, треугольниками – положения LO- и TO-фононов с учетом деформации второй области КТ

Спектры получены в поляризационных геометриях  $z(x+y, x+y)z$  и  $z(x, x)z$ , где  $z$  – ориентация (001),  $x$  – (100) и  $y$  – (010). В соответствии с поляризационными правилами отбора для рассеяния на оптических фононах Ge, которые определяются видом тензора КРС, при отражении от поверхности с ориентацией (001) в геометрии  $z(x+y, x+y)z$  активны только LO-фононы [17]. Рассеяние на TO-фононах запрещено. Из рис. 6, *a* видно, что в разрешенной геометрии проявляется интенсивный пик LO-фонона КТ Ge. Его интенсивность испытывает усиление при возбуждении спектра вблизи  $E_0$ -резонанса КТ (2,4–2,6 эВ), который связан с прямыми оптическими переходами между состояниями  $\Gamma_2$  и  $\Gamma_{25}$  квантовых точек Ge, а его энергия определяется размером КТ [7]. Высокая интенсивность LO-пика в разрешенной геометрии маскирует слабые линии остальных фононных мод, которые удается наблюдать в запрещенной геометрии  $z(x, x)z$  (рис. 6, *b*). Из рис. 6, *b* видно, что в этой геометрии интенсивность LO-фонона падает в 5 раз и наблюдаются дополнительные линии с частотами 266, 292 и 309  $\text{см}^{-1}$ . На рисунке стрелкой показано положение объемного фонона Ge. Два пика ( $\text{LO}_1$  и  $\text{TO}_1$ ) смещены относительно него в высокочастотную область, а другие два ( $\text{LO}_2$  и  $\text{TO}_2$ ) – в сторону низких частот.

Обнаруженная серия линий наблюдается в образцах, в которых КТ изолированы друг от друга ( $4 < h < 12\text{ нм}$ ) или смыкаются в сплошной слой ( $h = 12\text{ нм}$ ) без изменения напряженного состояния Ge [14]. В образцах, в которых начинается релаксация механических напряжений ( $h = 15\text{ нм}$ ), основной фононный пик ( $\text{LO}_1$ ) смещается в сторону объемного положения и уширяется, а остальные линии уже не проявляются в спектрах. В результате наблюдаемый спектр фононов может быть связан с распределением механических напряжений в КТ Ge.

Рассмотрим деформации КТ Ge и их влияние на спектр оптических фононов. Несоответствие постоянных решетки Ge и Si  $\Delta a/a = 0,04$ . В результате тонкая пленка Ge, полученная псевдоморфно к подложке Si (т. е. с идеально резкой границей раздела без введения дефектов и взаимного перемешивания материалов), двусоно деформирована в плоскости роста (001). Компоненты тензора деформации составляют  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = -0,04$ . Из граничного условия для свободной поверхности пленки  $\sigma_{zz} = 0$  ( $\sigma_{zz}$  – компонента тензора напряжений) можно найти  $\epsilon_{zz} = -(2c_{12}/c_{11}) = 0,03$ , где  $c_{12}$  и  $c_{11}$  – компоненты тензора упругости Ge. Двусоная деформация сжатия в плоскости ( $xу$ ) приводит к растяжению Ge в направлении  $z$ . Такое напряженное состояние вызывает сдвиг и расщепление частот LO- и TO-фононов, которые в объемном Ge при  $k = 0$  вырождены. Изменения частот и LO- и TO-фононов под действием деформации определяются выражениями [19]

$$\Delta\omega^L = [p\epsilon_{zz} + q(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})]/2\omega_0^2, \quad (7)$$

$$\Delta\omega^T = [p\epsilon_{xx} + q(\epsilon_{zz} + \epsilon_{yy})]/2\omega_0^2, \quad (8)$$

где  $\omega_0$  – частота оптических фононов Ge при  $k = 0$ ;  $p$  и  $q$  – компоненты тензора ангармонических постоянных Ge,  $p = -0,73(2\omega_0^2)$ ,  $q = -0,96(2\omega_0^2)$ . Выражения (7) и (8) для деформации псевдоморфной пленки Ge приводят к частотным сдвигам  $\Delta\omega_1^L = 16,5 \text{ см}^{-1}$ ,  $\Delta\omega_1^T = 11 \text{ см}^{-1}$ . Наблюдаемые сдвиги линий LO<sub>1</sub> и TO<sub>1</sub> относительно объемной частоты Ge составляют 16 и 9 см<sup>-1</sup> (см. рис. 6, б) соответственно. Эти значения вполне согласуются с расчетными с учетом того, что экспериментальное положение линии TO<sub>1</sub> несколько смещено в область низких частот из-за присутствия близкорасположенной линии (LO<sub>1</sub>) большей интенсивности. В результате линии КРС LO<sub>1</sub> и TO<sub>1</sub> связаны с рассеянием на фононах, локализованных в области КТ вблизи подложки Si, деформация которой не отличается от состояния псевдоморфной пленки Ge. Остальные две – LO<sub>2</sub> и TO<sub>2</sub>, смещенные в область низких частот (см. рис. 6, б), связаны с фононами, локализованными вблизи вершин КТ.

На рис. 7, а приведена схема сечения КТ, которое разделено штриховой линией на области 1 и 2. В области 1 усредненное значение деформации, определяющее фононные частоты, аналогично псевдоморфной пленке Ge. В области 2 высотой  $h$  компоненты тензора деформации по сравнению с областью 1 меняют знак из-за того, что Si-матрица, покрывающая Ge, сжимает КТ в направлении  $z$ . При увеличении расстояния от подложки эта силовая составляющая растет, а составляющая сжатия в плоскости роста со стороны подложки падает. В результате деформация обращается в нуль в плоскости,

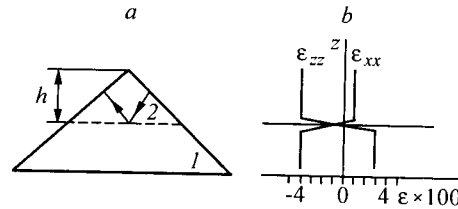


Рис. 7. Схема поперечного сечения квантовой точки Ge (а) и зависимости усредненных (в областях 1 и 2) компонент тензора деформации  $\epsilon_{xx}$  и  $\epsilon_{zz}$  от координаты  $z$  (б)

отмеченной на рис. 7, *a* штриховой линией, а далее в области 2 меняет знак. На рис. 7, *b* показаны зависимости усредненных значений (в областях 1 и 2) компонент тензора деформации  $\epsilon_{xx}$  и  $\epsilon_{zz}$  от координаты  $z$ . Приведенная схема поясняет результаты численного расчета, выполненного для КТ InAs–GaAs [6].

Считая, что в области 2 компоненты тензора деформации составляют  $\epsilon_{zz} = -0,04$ ,  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = -(c_{12}/[c_{11} + c_{12}])\epsilon_{zz} = 0,011$ , из выражений (1) и (2) можно найти частотные сдвиги LO- и TO-фононов:  $\Delta\omega_2^T = 4,8 \text{ см}^{-1}$ ,  $\Delta\omega_2^L = 2,5 \text{ см}^{-1}$ . Положения линий КРС, соответствующие этим сдвигам, показаны на рис. 6 треугольниками. Различие частот оптических фононов областей 1 и 2, вызванное разницей механических напряжений в них, приводит к локализации фононов (т. е. фононы упруго отражаются от границы раздела в результате того, что амплитуда оптических колебаний резко затухает в соседней области). Из рис. 6, *b* видно, что линии LO<sub>2</sub>- и TO<sub>2</sub>-фононов области 2 смещены на 37 и 13 см<sup>-1</sup> соответственно в сторону низких частот относительно положений, определяемых деформацией.

Наблюдаемое низкочастотное смещение линий LO<sub>2</sub> и TO<sub>2</sub> мы связываем с размерным квантованием фононного спектра в области 2. Две грани пирамиды и граница раздела областей 1 и 2, от которых упруго отражаются фононы, образуют резонатор (см. рис. 7, *a*). Минимальный волновой вектор  $q$  возбуждаемых в нем фононов, которые регистрируются в КРС, определяется условием существования стоячей волны  $2hc\cos\alpha = \pi/q$ . Резонансная траектория фононов показана в области 2 стрелками (см. рис. 7, *a*), перпендикулярными боковым граням. Используя объемные дисперсионные зависимости фононов [20, 21], можно найти, что наблюдаемые частотные сдвиги для LO<sub>2</sub>- (37 см<sup>-1</sup>) и TO<sub>2</sub>-фононов (13 см<sup>-1</sup>) соответствуют волновому вектору  $q = 0,7/a$ , где  $a$  – постоянная решетки Ge. Отсюда высота области 2 составляет 4 Å. В результате действия сил сжатия со стороны Si-матрицы КТ распадается на две области высотой 4 и 11 Å, различающихся деформационным состоянием.

Отметим, что для КТ InAs смена знака деформации происходит на половине высоты пирамиды [6], а в нашем случае соотношение высот областей ~1:3. Это связано с различной формой КТ: угол при основании КТ InAs составляет 45° [6], а для КТ Ge 17°. В результате в нашем случае силовая составляющая сжатия со стороны подложки удерживает большую высоту Ge в псевдоморфном состоянии, а смена знака компонент тензора деформации происходит дальше от основания КТ по сравнению с КТ InAs.

Таким образом, исследованный фононный спектр КТ Ge объясняется тем, что КТ состоят из двух областей с различным деформационным состоянием. Первая область вблизи подложки Si деформирована аналогично псевдоморфной пленке, во второй области компоненты тензора деформации меняют знак. Наблюдаемое низкочастотное смещение линий LO- и TO-фононов во второй области, обусловленное размерным квантованием фононов, позволило определить характерные размеры областей КТ, различающихся деформационным состоянием.

**Заключение.** В работе исследовано КРС на оптических фононах в Si/Ge/Si-структурах с квантовыми точками Ge. Наблюдалось усиление интенсивности рассеяния на оптических фононах и на колебаниях границы раздела Ge–Si при возбуждении спектров в области  $E_0$ -резонанса. Показано,

что положение этого резонанса зависит от размера квантовых точек и определяется энергией электронного состояния  $\Gamma_2$ . Наблюдение усиления интенсивности КРС в условиях двойного резонанса позволило оценить параметр затухания электронного состояния  $\Gamma_2$  квантовых точек и получить дополнительную информацию об электронных состояниях границы раздела Ge-Si и о дырочных уровнях. Анализ наблюдаемого квазистационарного электронного состояния, проведенный в сферически-симметричной модели квантовой точки с учетом особенностей электронного спектра Si-матрицы, позволил установить характер локализации состояния данного типа.

В спектрах комбинационного рассеяния света на оптических фононах квантовых точек германия обнаружены дополнительные линии, смещенные в обе стороны относительно частоты объемного фонона Ge. Показано, что наблюдаемые фононные моды связаны с деформацией квантовых точек, возникающей из-за рассогласования постоянных решетки Ge и Si-матрицы. Обнаруженные сдвиги частот с учетом эффектов локализации оптических фононов позволили определить размер областей квантовых точек, различающихся деформационным состоянием.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Grundman M., Christen J., Ledentsov N. N. et al. Ultranarrow luminescence lines from single quantum dots // Phys. Rev. Lett. 1995. 74. P. 4043.
2. Froyen S., Wood D. M., Zanger A. Structural and electronic properties of epitaxial thin-layer  $\text{Si}_n\text{Ge}_n$  superlattices // Phys. Rev. B. 1988. 37. P. 6893.
3. Пацульников А. Ф., Леденцов Н. Н., Максимов М. В. и др. Фотолуминесценция квантовых точек InSb в матрицах GaAs и GaSb // ФТП. 1997. 31. С. 68.
4. Schittenhelm A., Gail M., Abstreiter G. Self-organized MBE growth of Ge-rich SiGe dots on Si(100) // Journ. Cryst. Growth. 1995. 157. P. 260.
5. Yakimov A. I., Markov V. A., Dvurechenskii A. V., Pchelyakov O. P. Conductance oscillations in Ge/Si heterostructures containing quantum dots // Journ. Phys. C. 1994. 6. P. 2573.
6. Grundmann M., Stier O., Bimberg D. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure // Phys. Rev. B. 1995. 52. P. 11969.
7. Талочкин А. Б., Марков В. А., Супрун С. П., Никифоров А. И. Комбинационное рассеяние света на оптических фононах в Si/Ge/Si-структурах с квантовыми точками // Письма в ЖЭТФ. 1996. 64. С. 203.
8. Markov V. A., Nikiforov A. I., Pchelyakov O. P. In situ RHEED control of direct MBE growth of Ge quantum dots on Si(001) // Journ. Cryst. Growth. 1997. 175. P. 736.
9. Mo Y. W., Savage D. E., Swartzentruber B. S., Lagally M. G. // Phys. Rev. Lett. 1990. 65. P. 1020.
10. Eaglesham D. J., Cerullo M. // Phys. Rev. Lett. 1990. 64. P. 1943.
11. De Gironcoli S., Molinari E., Schorer R., Abstreiter G. Interface mode in Si/Ge superlattices: Theory and experiment // Phys. Rev. B. 1994. 48. P. 8959.
12. Талочкин А. Б., Ефанов А. В., Марков В. А., Никифоров А. И. Рамановский  $E_0$ -резонанс квантовых точек германия в структурах Si/Ge/Si // Изв. РАН. Сер. физ. 1999. 63. С. 290.
13. Talochkin A. B., Markov V. A., Nikiforov A. I., Teys S. A. Raman  $E_0$  resonance in a system of germanium quantum dots // Phys. Low-Dim. Struct. 1999. 7/8. P. 117.
14. Wagner J., Cardona M. First-order Raman scattering in germanium resonant with the  $E_0$  gap // Solid Stat. Commun. 1985. 53. P. 845.

15. **Schorer R., Abstreiter G., Kibel H., Presting H.** Resonant-Raman-scattering study short-period Si/Ge superlattices // Phys. Rev. B. 1994. **50**. P. 16211.
16. **Van de Walle C. G., Martin R. M.** Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system // Phys. Rev. B. 1986. **34**. P. 5621.
17. **Кардона М., Гюнтеродт Г.** Рассеяние света в твердых телах. М.: Мир, 1984. Ч. 2.
18. **Талочкин А. Б., Марков В. А., Никифоров А. И., Тийс С. А.** Спектр оптических фононов квантовых точек германия // Письма в ЖЭТФ. 1999. **70**. С. 279.
19. **Cerdeira F., Buchenauer C. J., Pollak F. H., Cardona M.** Stress-induced shifts of first-order Raman frequencies of diamond-zinc-blend-type semiconductors // Phys. Rev. B. 1972. **5**. P. 580.
20. **Friess E., Eberl K., Menczgar U., Abstreiter G.** Strain and confinement effects on optical phonons in short period (100) Si/Ge superlattices // Solid Stat. Commun. 1990. **73**. P. 203.
21. **Weber F.** Adiabatic bond charge model for the phonons in diamond Si, Ge and Sn // Phys. Rev. B. 1977. **15**. P. 4789.

*Институт физики полупроводников СО РАН,  
E-mail: tal@thermo.isp.nsc.ru*

*Поступила в редакцию  
6 апреля 2001 г.*