

УДК 538.915

## МЕЖУРОВНЕВЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ $\text{Si}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}^*$

А. А. Блошкин

*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,  
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 13  
E-mail: bloskin@isp.nsc.ru*

Представлены результаты математического моделирования спектра дырок и оптического поглощения в квантовых ямах  $\text{Si}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ , сформированных на виртуальных подложках  $\text{Ge}_y\text{Si}_{1-y}$ . Показано, что наличие упругих деформаций в такой системе может существенно изменять положение линии поглощения в гетероструктурах  $\text{GeSi}$ . Подбором составов квантовой ямы и виртуальной подложки можно добиться изменения длины волны межподуровневого поглощения в диапазоне 6–12 мкм для света, поляризованного в плоскости квантовой ямы. При приложении деформации растяжения изменение интенсивности переходов дырок под влиянием света, поляризованного в плоскости квантовой ямы, достигает 1,8 раза. Деформация сжатия приводит к изменению интенсивности межподзонных переходов в 1,45 раза.

*Ключевые слова:* квантовые ямы, гетероструктуры  $\text{Ge}/\text{Si}$ , оптическое поглощение.

**Введение.** Успех в развитии технологий молекулярно-лучевой и газофазной эпитаксии позволил формировать совершенные гетероструктуры. Так, удаётся создавать очень тонкие слои материалов различных гетеропар с контролем толщины вплоть до атомного монослоя. Гетероструктуры  $\text{Ge}/\text{Si}$  с квантовыми ямами (КЯ) и квантовыми точками привлекают к себе особое внимание в качестве материалов опто- и наноэлектроники. Примеры реализации этих устройств можно найти в [1]. Однако из-за рассогласования параметров решётки  $\text{Ge}$  и  $\text{Si}$  в 4 % в таких материалах неизбежно присутствуют упругие деформации, которые существенно изменяют картину энергетических зон. Под влиянием одноосного сжатия подзоны тяжёлых и лёгких дырок расщепляются, при этом подзона тяжёлых дырок повышает свою энергию, а лёгких — понижает. В то же время в растянутых наноструктурах возможна ситуация, когда основным состоянием дырки становится состояние подзоны лёгких дырок. В работе [2] предсказано увеличение интенсивности оптических переходов в квантовой яме, основное состояние в которой сформировано лёгкими дырками, по сравнению с КЯ, основное состояние в которой сформировано тяжёлыми дырками. В этой работе рассматривались две структуры: недеформированная и растянутая. При вычислении интенсивности оптических переходов считалось, что энергия Ферми для дырок в таких структурах одинакова. В простейшем случае одной заполненной подзоны и параболического закона дисперсии в двумерной системе при нулевой температуре энергия Ферми  $E_F$  и концентрация дырок  $N_h$  связаны между собой соотношением [3]

$$N_h = \frac{m_h^*}{\pi \hbar^2} (E_0 - E_F). \quad (1)$$

Здесь  $m_h^*$  — эффективная масса дырки в соответствующей подзоне;  $\hbar$  — постоянная Планка;  $E_0$  — энергия дырки в основном состоянии в квантовой яме. Принимая  $E_0 = 0$ , мы

\*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 12-02-00149) и Министерства образования и науки РФ (ГК № 8228).

получаем при одинаковой энергии Ферми концентрацию дырок, пропорциональную эффективной массе в подзоне, соответствующей основному состоянию дырки. С увеличением концентрации дырок растёт и интенсивность межподзонных переходов. Между тем при формировании наноструктур с КЯ в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии путём управления концентрацией легирующей примеси контролируется концентрация дырок, локализованных в квантовой яме, а не энергия Ферми. Таким образом, главный вывод о том, что в растянутых гетероструктурах с КЯ увеличивается поглощение света по сравнению со сжатой ямой, можно подвергнуть сомнению. Исследование гетероструктур Ge/Si с КЯ, сформированными на релаксированных буферных слоях  $\text{Ge}_y\text{Si}_{1-y}$ , проведено в работе [4]. В ней сравнивались гетероструктуры Ge/Si с КЯ, в которых присутствовали деформации либо сжатия, либо растяжения, однако не было приведено сравнения интенсивностей межподзонных оптических переходов для разных типов гетероструктур.

Цель данной работы — получить ответ на вопрос: действительно ли инвертирование зонной структуры в квантовых ямах Si/Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si даёт увеличение коэффициента поглощения света по сравнению с КЯ нормальной структуры. Для решения поставленной задачи проведено детальное теоретическое исследование коэффициента поглощения света в квантовых ямах Si/Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si, сформированных на релаксированных буферных слоях Ge<sub>y</sub>Si<sub>1-y</sub>.

**Методика расчётов.** Для расчёта энергетического спектра дырок в квантовых ямах применяется  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -приближение, включающее в рассмотрение от четырёх до восьми зон [5–9]. Количество зон в задаче определяется соотношением между энергиями квантования дырок, величиной спин-орбитального взаимодействия в валентной зоне и шириной запрещённой зоны материала ямы. Так, для гетероструктур  $\text{A}_3\text{B}_5$  обычно используется четырёхзонная модель, содержащая подзоны тяжёлых и лёгких дырок, двукратно вырожденные по спину. В таких гетероструктурах величина спин-орбитального расщепления валентной зоны достаточно велика, поэтому состояния подзоны, отщеплённой спин-орбитальным взаимодействием, не учитываются в задаче. В гетероструктурах Ge/Si величина спин-орбитального расщепления существенно меньше, чем в  $\text{A}_3\text{B}_5$ . Таким образом, для расчёта энергетического спектра дырок необходимо принимать во внимание, как минимум, шесть зон, добавив в рассмотрение подзону, отщеплённую спин-орбитальным взаимодействием. В то же время для гетероструктур  $\text{A}_3\text{B}_5$  иногда используется шестизонная модель, в которой помимо состояний тяжёлых и лёгких дырок учитываются также состояния электронов в зоне проводимости [8]. Восемизонная [7, 9] модель оправдана, как правило, при исследовании узкощелевых полупроводников, когда существенно взаимодействие всех подзон валентной зоны и зоны проводимости. В данной работе применялась шестизонная модель, учитывающая состояния подзон тяжёлых и лёгких дырок, а также спин-отщеплённой подзоны.

Не менее важным вопросом после выбора количества зон, участвующих в рассмотрении, является постановка граничных условий для волновых функций дырок в валентной зоне с учётом того, что параметры Латтинжера  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  [10, 11] на границе раздела ямы и барьера имеют разрыв. Граничные условия авторами задавались различными способами. Например, в работах [12–15] показано, что при правильном выборе порядка дифференциальных операторов граничные условия будут удовлетворены автоматически. Так, диагональные члены оператора Гамильтона преобразуются следующим образом:  $Mk_i^2 \rightarrow k_i Mk_i$ , где  $k_i$  — соответствующая компонента оператора волнового вектора дырки. Во внедиагональных по  $k$  членах надо учитывать вклады от различных представлений группы симметрии кубического кристалла. Внедиагональные члены в уравнении Шрёдингера имеют вид

$$Nk_x k_y = k_x N_+ k_y + k_y N_- k_x. \quad (2)$$

Здесь  $N_+$  — вклад в соответствующую компоненту от подзон  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$ , в то время как подзоны  $\Gamma_{15}$  и  $\Gamma_{25}$  дают вклад посредством  $N_-$ . Для того чтобы учесть вклад данных подзон, запишем параметры Латтинжера в виде [12, 16]

$$\gamma_1 = -1 + 2\sigma + 4\pi + 4\delta; \quad \gamma_2 = \sigma - \pi + 2\delta; \quad \gamma_3 = \sigma + \pi - \delta. \quad (3)$$

Коэффициенты  $\sigma, \pi, \delta$  напрямую отражают вклад подзон, характеризующихся различными представлениями группы симметрии, в параметры Латтинжера. Таким образом, следуя рассуждениям, приведённым в работе [12], можно записать гамильтониан в виде

$$H_{6 \times 6} = \begin{bmatrix} P + Q & -S_- & R & 0 & (1/\sqrt{2})S_- & \sqrt{2}R \\ -S_-^\dagger & P - Q & C & R & \sqrt{2}Q & \sqrt{3/2}\Sigma_- \\ R^\dagger & C^\dagger & P - Q & -S_+ & -\sqrt{3/2}\Sigma_+ & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^\dagger & -S_+^\dagger & P + Q & -\sqrt{2}R^\dagger & (1/\sqrt{2})S_+ \\ (1/\sqrt{2})S_-^\dagger & \sqrt{2}Q & -\sqrt{3/2}\Sigma_+^\dagger & -\sqrt{2}R & P - \Delta & -C \\ \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{3/2}\Sigma_-^\dagger & \sqrt{2}Q & (1/\sqrt{2})S_+^\dagger & C^\dagger & P - \Delta \end{bmatrix}. \quad (4a)$$

Здесь используются следующие обозначения:

$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}; \quad k_z = -i\partial/\partial z; \quad k_\pm = k_x \pm ik_y;$$

$$\tilde{\gamma} = (\gamma_2 + \gamma_3)/2; \quad \mu = (\gamma_3 - \gamma_2)/2;$$

$$P = E_V(z) - \hbar^2/(2m_0)(\gamma_1 k^2 + k_z \gamma_1 k_z); \quad Q = \zeta(z) - \hbar^2/(2m_0)(\gamma_2 k^2 - 2k_z \gamma_2 k_z); \quad (4b)$$

$$R = -(\sqrt{3}/2)\hbar^2/(2m_0)(\tilde{\gamma} k_-^2 + (\sqrt{3}/2)\mu k_+^2); \quad S_\pm = \sqrt{3}k_\pm(k_z(\sigma - \delta) + \pi k_z);$$

$$\Sigma_\pm = \sqrt{3}k_\pm([1/3(\sigma - \delta) + 2/3\pi]k_z + k_z[2/3(\sigma - \delta) + 1/3\pi]);$$

$$C = k_-[k_z(\sigma - \delta - \pi) - (\sigma - \delta - \pi)k_z]; \quad \zeta(z) = -b(2\varepsilon_{zz} - (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}));$$

$m_0$  — масса свободного электрона;  $E_V(z)$  — энергия потолка валентной зоны в яме или барьере с учётом сдвига, обусловленного гидростатической деформацией;  $b$  — двуосный деформационный потенциал в валентной зоне;  $\varepsilon_{ij}$  — компоненты тензора деформаций. Для квантовых двумерных слоёв с постоянной решётки  $a_l$ , выращенных на подложке с постоянной решётки  $a_0$ , компоненты тензора деформаций имеют следующий вид:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = (a_0 - a_l)/a_0; \quad \varepsilon_{zz} = (2c_{12}/c_{11} + 1)\varepsilon_{xx}. \quad (5)$$

В отличие от объёмных материалов в гамильтониане для гетероструктур присутствует член  $C$ , который характеризует перемешивание состояний  $|3/2, \pm 1/2\rangle$  на гетерогранице между ямой и барьером. Кроме того, этот член описывает перемешивание состояний  $|1/2, \pm 1/2\rangle$ . Параметр  $\mu$  в гамильтониане Латтинжера учитывает гофрировку изоэнергетических поверхностей. Случай  $\mu = 0$  соответствует аксиальному приближению.

Энергии связи и волновые функции дырки находились как собственные числа и собственные векторы матрицы оператора Гамильтона. Из-за смешивания состояний тяжёлых

и лёгких дырок, а также дырок из спин-отщеплённой подзоны при  $k_{\parallel} \neq 0$  подзоны размерного квантования не могут быть описаны определённой эффективной массой, однако для удобства они обозначены эффективной массой при  $k_{\parallel} = 0$  ( $hh$  — тяжёлые дырки,  $lh$  — лёгкие дырки,  $so$  — спин-отщеплённая подзона). Кроме того, при  $k_{\parallel} \neq 0$  компоненты матричного элемента оператора импульса отличны от нуля, поэтому все оптические переходы, поляризованные в плоскости квантовой ямы, становятся оптически активными.

Для вычисления коэффициента поглощения света использовалось выражение

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{n c m_0 \omega d} \sum_{i,j} |\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_{fi}|^2 [f(E_i) - f(E_j)] \frac{\Gamma}{\pi[(E_i - E_f - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2]}, \quad (6)$$

где  $\omega$  — частота поглощаемого фотона;  $n$  — показатель преломления среды;  $c$  — скорость света;  $d$  — ширина квантовой ямы;  $f(E_i)$  — вероятность заселения уровня с энергией  $E_i$  дырками. Для представления полученных результатов  $\delta$ -функция от энергии была заменена лоренцевской функцией распределения с параметром уширения  $\Gamma = 10$  мэВ. Квадрат модуля  $|\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_{fi}|^2$  матричного элемента оператора импульса, взятого между состояниями  $i$  и  $f$ , описан, например, в [17]. В предлагаемой работе учитывались три первые подзоны тяжёлых и лёгких дырок, а также первая подзона, сформированная спин-орбитально отщеплёнными дырками. Концентрацию дырок в квантовой яме мы принимали равной  $10^{12}$  см $^{-2}$ , при этом можно пренебречь влиянием многочастичных эффектов на спектр дырок и матричные элементы оптических переходов.

**Результаты расчётов.** Энергию связи дырок в КЯ Si/Ge $_{0,5}$ Si $_{0,5}$ /Si, сформированной на релаксированных буферных слоях Ge $_y$ Si $_{1-y}$  для составов  $y = 0,3$  и  $y = 0,7$ , демонстрирует рис. 1. Состав  $y = 0,3$  соответствует сжатой яме (рис. 1, *a*), а  $y = 0,7$  — растянутой (рис. 1, *b*). Ширина КЯ составляет 5 нм, ширины барьеров слева и справа — по 10 нм. Из приведённого рисунка видно, что в растянутой яме основное состояние дырки сформировано подзоной лёгких дырок, в случае сжатой ямы — подзоной тяжёлых дырок. Таким образом, произошло инвертирование зонной структуры квантовой ямы [2, 17, 18].

На рис. 2 представлены рассчитанные спектры поглощения света для ТЕ- и ТМ-поляризаций в КЯ Si/Ge $_{0,5}$ Si $_{0,5}$ /Si, сформированной на релаксированных буферах твёрдого раствора Ge $_y$ Si $_{1-y}$  с составом  $y$ , изменяющимся от 0,3 до 0,7. Температура в расчётах

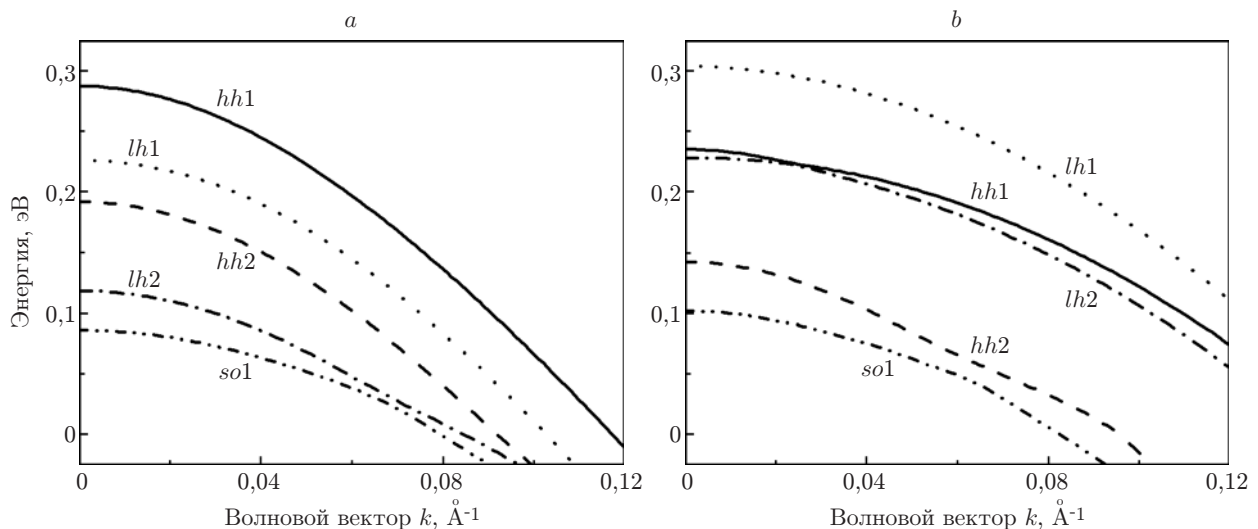


Рис. 1. Энергия связи дырок в квантовой яме Si/Ge $_{0,5}$ Si $_{0,5}$ /Si, сформированной на виртуальных подложках: Ge $_{0,3}$ Si $_{0,7}$  (*a*) и Ge $_{0,7}$ Si $_{0,3}$  (*b*)

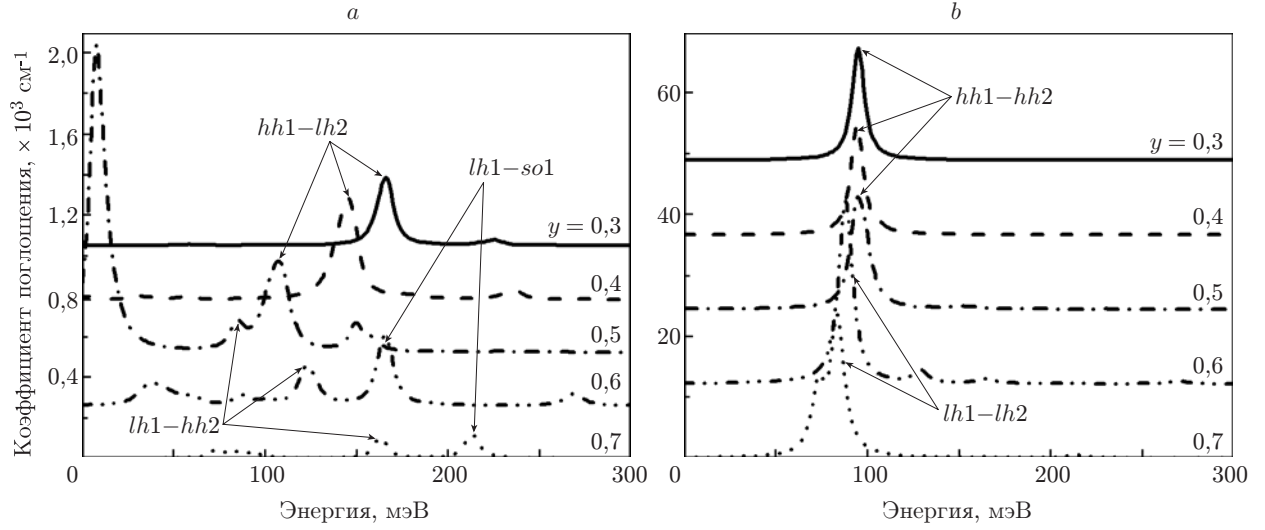


Рис. 2. Коэффициент поглощения света для квантовой ямы  $\text{Si}/\text{Ge}_{0,5}\text{Si}_{0,5}/\text{Si}$ , сформированной на виртуальных подложках  $\text{Ge}_y\text{Si}_{1-y}$  с содержанием Ge от 30 до 70 %: в ТЕ- (а) и ТМ-поляризации (б). Оптически активные переходы указаны стрелками

составляла 80 К. Из рисунка видно, что с увеличением содержания Ge в подложке уменьшается интенсивность пиков оптического поглощения в ТЕ-поляризации, тогда как в ТМ-поляризации интенсивность возрастает. При увеличении  $y$  от 0,3 до 0,5 интенсивность пика поглощения практически не меняется, повышение до 0,6 увеличивает интенсивность пика практически в 2 раза, после чего идёт спад интенсивности поглощения. В сжатой КЯ двусная деформация приводит к тому, что энергия тяжёлых дырок растёт, а лёгких понижается. Основным состоянием дырки в КЯ становится подзона тяжёлых дырок. В случае деформации растяжения ( $y < 0,5$ ) структура подзон валентной зоны инвертируется и основным состоянием дырки становится подзона лёгких дырок. Для того чтобы понять, как влияет порядок следования подзон на оптическое поглощение, рассмотрим матричный элемент оператора импульса

$$p_\rho = -\hbar \begin{pmatrix} (\gamma_1 + \gamma_2)k & -\sqrt{3}\gamma_3k_z & -\sqrt{3}\tilde{\gamma}k & 0 & -\sqrt{3/2}\gamma_3k_z & -\sqrt{6}\tilde{\gamma}k \\ -\sqrt{3}\gamma_3k_z & (\gamma_1 - \gamma_2)k & 0 & -\sqrt{3}\tilde{\gamma}k & \sqrt{2}\gamma_2k & 3/\sqrt{2}\tilde{\gamma}k_z \\ -\sqrt{3}\tilde{\gamma}k & 0 & (\gamma_1 - \gamma_2)k & -\sqrt{3}\gamma_3k_z & -3/\sqrt{2}\tilde{\gamma}k_z & \sqrt{2}\gamma_2k \\ 0 & -\sqrt{3}\tilde{\gamma}k & -\sqrt{3}\gamma_3k_z & (\gamma_1 + \gamma_2)k & \sqrt{6}\tilde{\gamma}k & \sqrt{3/2}\tilde{\gamma}k_z \\ -\sqrt{3/2}\gamma_3k_z & \sqrt{2}\gamma_2k & -3/\sqrt{2}\tilde{\gamma}k_z & \sqrt{6}\tilde{\gamma}k & \gamma_1k & 0 \\ -\sqrt{6}\tilde{\gamma}k & 3/\sqrt{2}\tilde{\gamma}k_z & \sqrt{2}\gamma_2k & \sqrt{3/2}\tilde{\gamma}k_z & 0 & \gamma_1k \end{pmatrix}, \quad (7a)$$

$$p_z = -\hbar \begin{pmatrix} (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z & -\sqrt{3}\tilde{\gamma}k & 0 & 0 & \sqrt{3/2}\tilde{\gamma}k & 0 \\ -\sqrt{3}\tilde{\gamma}k & (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z & 0 & 0 & -4\sqrt{2}\gamma_2k_z & 3/\sqrt{2}\tilde{\gamma}k \\ 0 & 0 & (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z & -\sqrt{3}\tilde{\gamma}k & -3/\sqrt{2}\tilde{\gamma}k & -4\sqrt{2}\gamma_2k_z \\ 0 & 0 & -\sqrt{3}\tilde{\gamma}k & (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z & 0 & \sqrt{3/2}\tilde{\gamma}k \\ \sqrt{3/2}\tilde{\gamma}k & -4\sqrt{2}\gamma_2k_z & -3/\sqrt{2}\tilde{\gamma}k & 0 & \gamma_1k_z & 0 \\ 0 & 3/\sqrt{2}\tilde{\gamma}k & -4\sqrt{2}\gamma_2k_z & \sqrt{3/2}\tilde{\gamma}k & 0 & \gamma_1k_z \end{pmatrix}. \quad (7b)$$

Здесь  $p_p$  — матричный элемент оператора импульса, соответствующий поглощению света, поляризованного в плоскости КЯ;  $p_z$  — компонента, описывающая поглощение света, поляризованного перпендикулярно квантовой яме. При малых значениях волнового вектора  $k$  оптически активными будут лишь переходы между компонентами спинора, содержащими  $k_z$ . При этом компоненты волновых функций дырки, между которыми берётся матричный элемент, должны различаться чётностью. Таким образом, в случае оптического поглощения света, поляризованного перпендикулярно квантовой яме, будут активны переходы  $hh1-hh2$ ,  $lh1-lh2$ ,  $so1-so2$ , а также переходы  $lh1-so2$  и  $lh2-so1$ . Для ТЕ-поляризации активными будут переходы  $hh1-lh2$ ,  $lh1-hh2$ ,  $hh1\uparrow-so2\uparrow$ ,  $lh1\uparrow-so2\downarrow$  (здесь стрелки указывают на проекцию спина дырки в соответствующей подзоне на ось  $Z$ ) и переходы с противоположными проекциями спина на ось  $Z$ . При ТМ-поляризации света интенсивность переходов между состояниями лёгких дырок превышает интенсивность переходов между состояниями тяжёлых дырок благодаря меньшей эффективной массе лёгких дырок. Оценить приращение интенсивности переходов можно из соотношения эффективных масс лёгких и тяжёлых дырок в КЯ:

$$\frac{\alpha_{lh1 \rightarrow lh2}}{\alpha_{hh1 \rightarrow hh2}} = \frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{\gamma_1 - 2\gamma_2}. \quad (8)$$

Для кремния отношение интенсивностей переходов при ТМ-поляризации света будет составлять 1,67, в случае германия данное соотношение даёт значение 4,67. Для нашей гетероструктуры отношение интенсивностей поглощения света в ТМ-поляризации при смене типа основного состояния дырки составило 1,62, что близко к результату, полученному для кремния. Ожидаемая величина данного эффекта на уровне 2,5–3 (исходя из линейной интерполяции значений для Si и Ge) отличается от реально полученной, по-видимому, из-за неодинаковости волновых функций дырок в сжатых и растянутых гетероструктурах.

В случае ТЕ-поляризации интенсивность переходов характеризуется одним и тем же параметром  $\tilde{\gamma}$ . Поэтому зависимость интенсивности перехода от степени растяжения квантовой ямы не может быть объяснена только изменением эффективной массы носителя

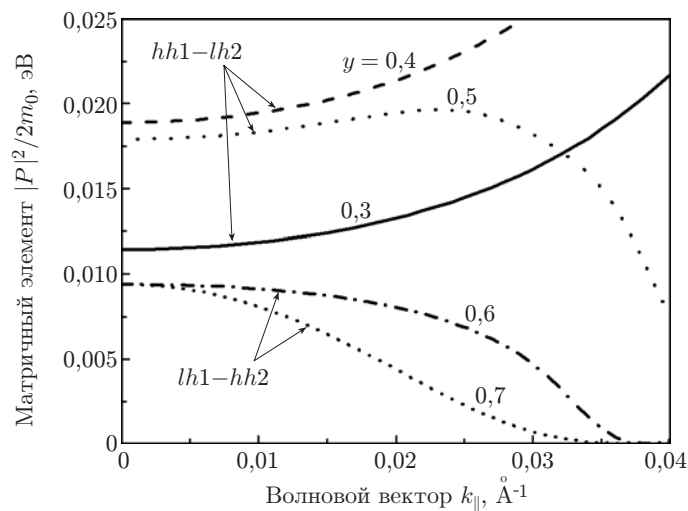


Рис. 3. Матричные элементы переходов  $hh1-lh2$  для сжатых ям и  $lh1-hh2$  для растянутых ям как функции волнового вектора дырки в квантовой яме. Цифры на графике указывают содержание Ge в виртуальной подложке. Видно, что матричный элемент оптического перехода  $hh1-lh2$  почти в 2 раза больше матричного элемента оптического перехода  $lh1-hh2$  при  $k_{||} = 0$

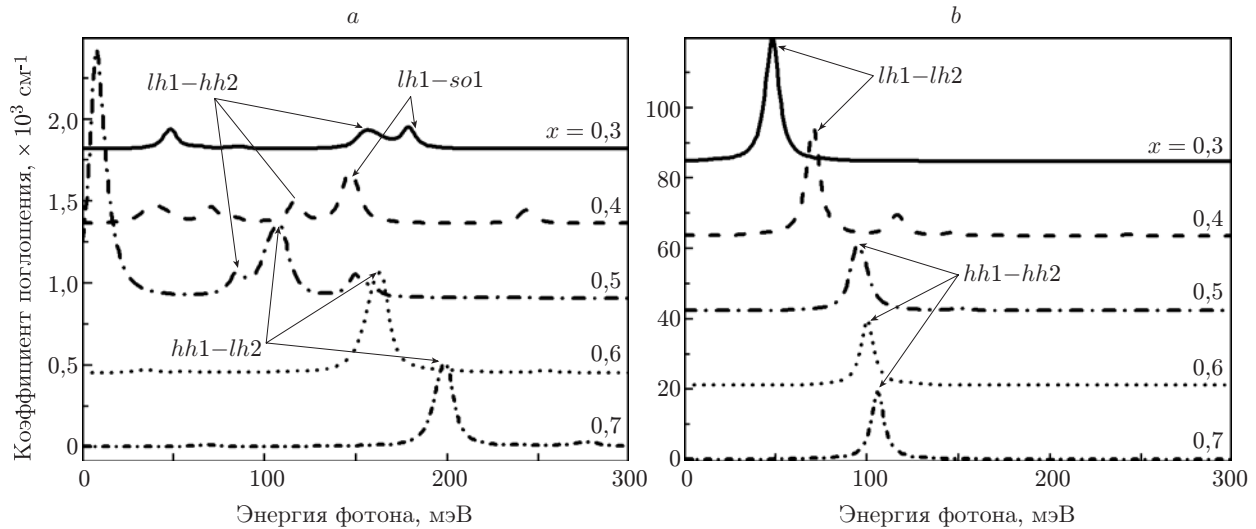


Рис. 4. Коэффициент поглощения света для квантовой ямы  $\text{Si}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ , сформированной на виртуальной подложке, содержащей 50 % Ge: в ТЕ- (a) и ТМ-поляризации (b). При растяжении КЯ растёт поглощение в ТМ-поляризации и падает в ТЕ-поляризации. Оптически активные переходы в таких квантовых ямах указаны стрелками

заряда. На рис. 3 представлена зависимость величины матричного элемента основного перехода для ТЕ-поляризации от квазиимпульса. Для ям, сформированных на подложках с содержанием Ge  $y < 0,5$ , основной линией является переход  $hh1-lh2$ , в то время как для подложек с  $y > 0,5$  — переход  $lh1-hh2$ . Видно, что при  $k = 0$  матричные элементы переходов  $lh1-hh2$  для подложек с  $y = 0,6$  и  $y = 0,7$  практически совпадают. Таким образом, спад величины интенсивности внутризонного оптического поглощения при увеличении деформации в яме полностью объясняется фактором  $1/\omega$  в выражении для интенсивности переходов. Благодаря увеличению энергии оптического перехода в ТЕ-поляризации при растяжении ямы интенсивность перехода падает. Между тем из рис. 3 видно, что при  $k = 0$  матричный элемент оптического перехода  $hh1-lh2$  почти в 2 раза превышает матричный элемент оптического перехода  $lh1-hh2$ . Данный факт, по-видимому, связан с различной конфигурацией волновых функций тяжёлых и лёгких дырок для сжатой и растянутой ям. В то же время в ТМ-поляризации зависимость энергии перехода от деформации ямы не столь существенна. Этот факт может быть объяснён следующим образом: оптические переходы в ТМ-поляризации происходят между подзонами одного типа (либо  $hh1-hh2$ , либо  $lh1-lh2$ ), поэтому влияние деформации сводится лишь к изменению глубины потенциальной ямы, что меняет глубину залегания уровней, но практически не изменяет энергетический зазор между ними. Понять данный момент можно из оценки величины энергетического зазора  $\Delta E_{12}$  в квантовой яме с бесконечными стенками:  $\Delta E_{12} \sim \hbar^2/(2m^*a^2)$ . Эта величина зависит лишь от размера ямы  $a$ . В то же время в случае ТЕ-поляризации оптические переходы происходят между состояниями тяжёлых и лёгких дырок. А эти две подзоны под влиянием деформации смещаются относительно друг друга, что приводит к сильной зависимости энергии перехода от того, насколько яма сжата или растянута. Заметим, что абсолютно аналогичная картина зависимости интенсивности оптического перехода от энергии наблюдается в случае квантовых ям, сформированных на подложках с содержанием Ge  $y = 0,5$ , но при этом меняется содержание Ge в квантовой яме от  $x = 0,3$  до  $x = 0,7$ . Данная зависимость приведена на рис. 4.

**Заключение.** В предлагаемой работе рассчитаны энергии связи и интенсивности оптических переходов в квантовых ямах  $\text{Si}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ , сформированных на виртуальных

подложках  $\text{Ge}_y\text{Si}_{1-y}$  с содержанием Ge  $x$  и  $y$  в диапазоне 0,3–0,7. Установлено, что в случае наноструктуры, в которой присутствует деформация сжатия, основное состояние дырки сформировано подзоной тяжёлых дырок, а в случае растянутой — подзоной лёгких дырок. Для ТМ- и ТЕ-поляризаций дырок энергия и интенсивность оптического перехода ведут себя существенно по-разному. Энергия перехода в ТМ-поляризации не зависит от деформации квантовой ямы, в то время как в ТЕ-поляризации наблюдается сильная зависимость энергии оптического перехода от деформации ямы: энергия перехода увеличивается с ростом величин сжатия и растяжения ямы. При изменении состава подложки  $\text{Ge}_y\text{Si}_{1-y}$  в диапазонах от  $y = 0,5$  до  $y = 0,7$  меняется интенсивность оптического поглощения в квантовой яме  $\text{Si}/\text{Ge}_{0,5}\text{Si}_{0,5}/\text{Si}$  в 1,8 раза. Для изменения состава подложки от  $y = 0,5$  до  $y = 0,3$  интенсивность меняется в 1,45 раза. Сжатие или растяжение наноструктуры с квантовой ямой  $\text{Si}/\text{Ge}_{0,5}\text{Si}_{0,5}/\text{Si}$  вызывает изменение длины волны поглощения в диапазоне 6–12 мкм. При использовании напряжённых КЯ  $\text{Si}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ , выращенных на виртуальных подложках  $\text{Ge}_y\text{Si}_{1-y}$ , в качестве активной области фотоприёмного устройства на 8–12 мкм возможно управление откликом фотоприёмника благодаря изменению содержания германия в подложке или иному способу введения в структуру однородного распределения упругих деформаций.

Автор выражает благодарность д-ру физ.-мат. наук А. И. Якимову за плодотворное обсуждение работы.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Handbook** of Semiconductor Nanostructures and Nanodevices. Vol. 1. Quantum Dots, Nanowires and Self-Assemblies /Eds. A. A. Balandin, K. L. Wang. Stevenson Ranch: American Scientific Publ., 2006. 515 p.
2. **Xie H., Katz J., Wang W. I.** Infrared absorption enhancement in light- and heavy-hole inverted  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}/\text{Al}_{1-y}\text{Ga}_y\text{As}$  quantum wells // *Appl. Phys. Lett.* 1991. **59**, N 27. P. 3601–3603.
3. **Ando T., Fowler A. B., Stern F.** Electronic properties of two dimensional systems // *Rev. Modern Phys.* 1982. **54**, N 2. P. 437–672.
4. **Lin G. J., Lai H. K., Li C. et al.** Preliminary design of a tensile-strained p-type  $\text{Si}/\text{SiGe}$  quantum well infrared photodetector // *Semicond. Sci. Technol.* 2008. **23**, Is. 3. 035011.
5. **Chang Y., James R.** Saturation of intersubband absorption transitions in p-type // *Phys. Rev. B.* 1989. **39**, N 17. 12672.
6. **Wessel R., Altarelli M.** Analytic solutions of effective-mass equation in strained  $\text{Si}-\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  heterostructures applied to resonant tunneling // *Phys. Rev. B.* 1989. **40**, N 18. 12457.
7. **Eppenga R., Schuurmans M., Colak S.** New  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  theory for  $\text{GaAs}/\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ -type quantum wells // *Phys. Rev. B.* 1987. **36**, N 3. 1554.
8. **Altarelli M.** Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in  $\text{InAs}-\text{GaSb}$  superlattice // *Phys. Rev. B.* 1983. **28**, N 2. P. 842–845.
9. **Novik E., Pfeuffer-Jeschke A., Jungwirth T. et al.** Band structure of semimagnetic  $\text{Hg}_{1-y}\text{Cd}_y\text{Te}$  quantum wells // *Phys. Rev. B.* 2005. **72**, N 3. 035321.
10. **Luttinger J.** Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory // *Phys. Rev.* 1956. **102**, N 4. P. 1030–1041.
11. **Luttinger J., Kohn W.** Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields // *Phys. Rev.* 1955. **97**, N 4. P. 869–883.
12. **Foreman B.** Effective-mass Hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures // *Phys. Rev. B.* 1993. **48**, N 7. P. 4964–4967.



- 
13. **Foreman B.** Elimination of spurious solutions from eight-band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  theory // Phys. Rev. B. 1997. **56**, N 20. P. R12748–R12751.
  14. **Burt M.** Fundamentals of envelope function theory for electronic states and photonic modes in nanostructures // Journ. Phys.: Condensed Matter. 1999. **11**, N 9. P. R53–R83.
  15. **Burt M.** The justification of applying the effective-mass equation to microstructures // Journ. Phys.: Condensed Matter. 1992. **4**, N 32. P. 6651–6690.
  16. **Kane E. O.** Energy band theory // Handbook on Semiconductors /Eds. T. S. Moss, W. Paul. Amsterdam: North-Holland, 1982. Vol. 1, Ch. 4. P. 193–217.
  17. **Chun S. K., Pan D. S., Wang K. L.** Intersubband transitions in a p-type  $\delta$ -doped SiGe/Si quantum wells // Phys. Rev. B. 1993. **47**, N 23. P. 15638–15647.
  18. **Rauter P., Mussler G., Grutzmacher D., Fromhertz T.** Tensile strained SiGe infrared photodetectors based on light-hole ground state // Appl. Phys. Lett. 2011. **98**, N 21. 211106.

*Поступила в редакцию 9 июля 2013 г.*

---