

Спектры электронов и дырок и правила отбора для оптических переходов в гетероструктуре $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$

© В.Я. Алешкин, Н.А. Бекин

Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603600 Нижний Новгород, Россия

(Получена 20 ноября 1995 г. Принята к печати 15 января 1996 г.)

Исследованы спектры электронов и дырок в напряженных гетероструктурах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$, выращенных на плоскости (111). Показано, что с помощью исследования поляризации фотолюминесценции из этих структур можно определить строение зоны проводимости в них. Найдены правила отбора для непрямых оптических переходов.

Введение

Материалы на основе кремния представляют большой интерес в связи с его широким использованием в электронике и хорошим развитием кремниевой технологии. В частности, в последние годы интенсивно исследуются гетероструктуры $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$ и $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$.

Поскольку Ge и Si имеют постоянные решетки, отличающиеся примерно на 4%, то хотя бы один из материалов в таких гетероструктурах деформирован. Причем бездислокационными могут быть структуры с тонкими слоями, в которых энергия упругой деформации меньше энергии образования дислокации на гетерогранице. К настоящему времени хорошо известно, что в гетероструктурах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$ и $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$ потенциальными ямами для дырок являются слои с меньшей долей Si в широком диапазоне деформаций и для любой ориентации плоскости роста (см., например, [1–5]). Однако до сих пор отсутствует полное представление о строении зоны проводимости в этих гетероструктурах в широком диапазоне их параметров. Это объясняется тем, что в зоне проводимости как Ge и Si, так и твердого раствора имеется несколько долин, положение которых зависит от деформации, x и от толщины слоев (из-за эффектов размерного квантования). Даже для интенсивно изучаемых сейчас систем $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$, псевдоморфно выращенных на Si, существуют неоднозначные и противоречивые данные о том, какой из слоев является потенциальной ямой для электронов при x , близких к единице [1,6,7].

В настоящей работе проведены расчеты спектров электронов и дырок в гетероструктуре $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$, выращенной на плоскости (111), и найдены правила отбора для межзонных дипольных переходов в этой системе. Найдено, что дно зоны проводимости в Ge может быть как ниже, так и выше дна зоны проводимости твердого раствора в зависимости от деформации и состава твердого раствора. Показано, что с помощью исследования поляризационных зависимостей фотолюминесценции можно определить тип

долины в абсолютном минимуме зоны проводимости в этих гетероструктурах.

Несмотря на непрямую структуру зон Ge, Si и их твердого раствора, гетероструктуры $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$ могут быть прямозонными [8]. Прямая структура зон реализуется, когда дно зоны проводимости находится в точке зоны Бриллюэна, квазиимпульс которой в объемном материале перпендикулярен гетерограницам. В этом случае в структурах с тонкими слоями электрон легко теряет этот квазиимпульс при столкновении с гетерограницей. Формально это проявляется в том, что для структур с туннельно-несвязанными квантовыми ямами зона Бриллюэна для электронов двумерна. В ней отсутствует импульс, перпендикулярный гетерограницам. В короткопериодических сверхрешетках это проявляется в свертке зоны Бриллюэна, в результате которой минимум зоны проводимости оказывается в ее центре.

Разрывы энергетических зон

Для нахождения спектров электронов и дырок в гетероструктуре необходимы значения величин разрывов энергетических зон. Мы будем использовать эти значения из работы [4]. Отметим, что для $x < 0.3$ и постоянных решетки $5.43 \text{ \AA} < a < 5.65 \text{ \AA}$ значения разрывов энергий валентных зон, рассчитанные в работе [5], примерно на 30% меньше, а измеренные в [2] примерно на 6% больше, чем в [4]. Согласно [4], величина средней энергии в валентной зоне в твердом растворе $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ и определяется выражением

$$E_{av} = (90.9a_{\parallel} - 1073.6)x. \quad (1)$$

Здесь и далее энергия выражена в мэВ. Величина a_{\parallel} выражается в \AA и равна расстоянию между ближайшими атомами в плоскости роста, умноженному на $\sqrt{2}$. Предполагалось, что в недеформированном кремнии $a_{\parallel} = 5.43 \text{ \AA}$, в недеформированном германии $a_{\parallel} = 5.65 \text{ \AA}$, а также, что структура псевдоморфна (a_{\parallel} одинакова для обоих материалов гетеропары).

Для $a_{||}$ недеформированного твердого раствора использовалась квадратичная интерполяция [9]:

$$a_{||} = 5.65 - 0.24x(1-x) - 0.22x^2, \text{ \AA}. \quad (2)$$

Под средней энергией валентной зоны E_{av} понимается среднее значение энергии максимумов трех валентных зон (тяжелой, легкой и спин-отщепленной).

Положение потолков зон тяжелых, легких и спин-отщепленных дырок E_{hh} , E_{lh} , E_{sh} определяется из формул

$$E_{hh} = E_{av} + \frac{\Delta}{3} - \frac{\delta E}{2}, \quad (3)$$

$$E_{lh} = E_{av} - \frac{\Delta_0}{6} + \frac{\Delta E}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E + \frac{9}{4} (\delta E)^2}, \quad (4)$$

$$E_{sh} = E_{av} - \frac{\Delta_0}{6} + \frac{\delta E}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E + \frac{9}{4} (\delta E)^2}, \quad (5)$$

$$\delta E = 2\sqrt{3}d\varepsilon_{xy}, \quad (6)$$

где ε_{xy} — xy -компонента тензора деформации, d — одна из деформационных постоянных, Δ_0 — величина спин-орбитального расщепления.

$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{3} \left(1 - \frac{a_{||}}{a_0} \right) \left(1 + 2 \frac{C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \right),$$

C_{ij} — упругие модули, a_0 — постоянные решетки в недеформированном кристалле. Оси x , y , z направлены вдоль [100], [010], [001] соответственно. Отметим, что тяжелыми мы называем дырки с большей массой в направлении [111].

Ширина запрещенной зоны недеформированного твердого раствора экспериментально изучалась в работе [10]. Мы будем использовать для разности энергий L - и Δ -долин и потолка валентной зоны (соответственно E_g^L и E_g^Δ) выражения из этой работы (температура $T = 4.2$ К):

$$E_g^L = 740 + 1270x, \quad (7)$$

$$E_g^\Delta = 931 + 18x + 206x^2. \quad (8)$$

Будем полагать их справедливыми во всем интервале x . Для формулы (8) это вполне оправданно, так как она хорошо аппроксимирует экспериментально измеренную величину E_g^Δ в широком интервале x ($0.15 < x < 1$). Напомним, что при $x < 0.15$ нижними долинами в недеформированном твердом растворе являются L -долины, а при $x > 0.15$ — Δ -долины. Из-за малости интервала x , в котором имеются экспериментальные данные для E_g^L , формула (7) может приводить к значительным погрешностям для x , близких к 1.

Для вычисления величины расщепления зон и изменения ширины запрещенной зоны под действием деформации использовались теоретически рассчитанные в [4] константы деформационного потенциала чистых Ge и Si. Для вычисления всех параметров

твердого раствора использовалась линейная интерполяция по x .

Деформация приводит к расщеплению энергии минимумов L -долин. Долину, ось вращения изоэнергетической поверхности которой направлена вдоль [111], будем называть $1L$ -долиной, а три остальные долины — $3L$ -долинами. Положение их минимумов задается выражениями

$$E_{1L} = E_L + 2\Xi_u^L \varepsilon_{xy}, \quad (9)$$

$$E_{3L} = E_L - \frac{2}{3}\Xi_u^L \varepsilon_{xy}, \quad (10)$$

$$E_L = E_{av} + E_g^L + \left(\Xi_d^L + \frac{\Xi_u^L}{3} - a \right) (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{\Delta_0}{3}. \quad (11)$$

Вырождение минимумов Δ -долин не снимается при деформации в плоскости (111) или вдоль направления [111], поэтому можно написать следующее выражение для соответствующей им энергии E_Δ :

$$E_\Delta = E_{av} + E_g^\Delta + \left(\Xi_d^\Delta + \frac{\Xi_u^\Delta}{3} - a \right) (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{\Delta_0}{3},$$

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \frac{4C_{44}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \left(\frac{a_{||}}{a_0} - 1 \right). \quad (12)$$

В (9)–(12) $\Xi_{u,d}^L$, $\Xi_{u,d}^\Delta$ — постоянные деформационного потенциала L -долин и Δ -соответственно, a — постоянная деформационного потенциала валентной зоны.

На рис. 1 приведены зависимости энергий экстремумов энергетических зон от x твердого раствора,

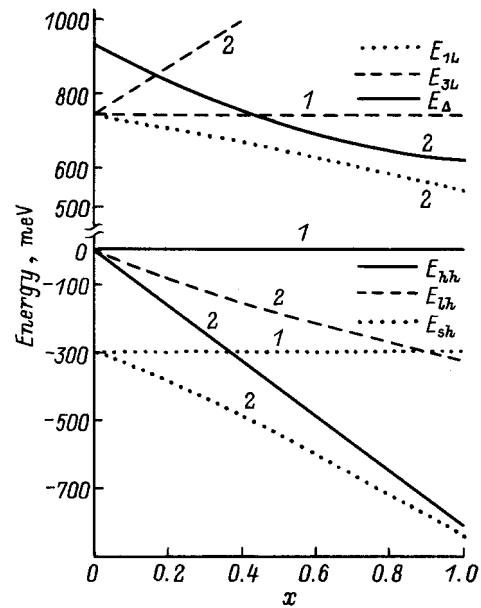


Рис. 1. Зависимости положения экстремумов зон в твердом растворе $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ от x (линии с индексом 2) для структуры, псевдоморфно выращенной на германии ($a_{||} = 5.65$ \AA). На рисунке приведены также положения экстремумов зон в германии (линии с индексом 1).

псевдоморфно выращенного на подложке германия (a_{\parallel} совпадает с постоянной решетки германия a_{Ge}). Из рисунка хорошо видно, что разрыв энергии потолка валентной зоны больше для тяжелых дырок, чем для легких. Причина этого — расщепление валентной зоны твердого раствора деформацией. Это утверждение справедливо для любых $5.43 \text{ \AA} < a < 5.65 \text{ \AA}$. Действительно, слои германия в этом случае могут быть только сжатыми в плоскости роста. Для таких слоев потолок зоны тяжелых дырок располагается выше, чем для легких, так как константа деформационного потенциала d_{Ge} валентной зоны в (6) меньше нуля. При этом, как уже отмечалось, средняя энергия валентной зоны в твердом растворе находится ниже, чем в германии. Если деформация твердого раствора другого знака, чем в германии, то в $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ потолок зоны легких дырок расположен выше, чем для тяжелых дырок ($d_{\text{GeSi}} < 0$), и потому разрыв зоны тяжелых дырок больше. Он больше также и в случае, когда деформация в обоих слоях одного знака, так как деформационное расщепление валентной зоны в германии в этом случае больше, чем в твердом растворе. Последнее объясняется тем, что во-первых, при этом $a_{\parallel} < 5.65 \text{ \AA}$ (a_{GeSi} характеризует недеформированный твердый раствор), и поэтому германий сильнее деформирован, и, во-вторых, $|d_{\text{GeSi}}| < |d_{\text{Ge}}|$.

Видно также, что для гетероструктур $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$, псевдоморфно выращенных на германии, абсолютный минимум зоны проводимости располагается в $1L$ -долине твердого раствора.

Спектры дырок

Спектры дырок находились численным интегрированием уравнения Шредингера с гамильтонианом Латтинжера с учетом деформации [11]. Граничные условия для волновых функций выбирались аналогично [12].

На рис. 2 приведены зависимости энергий потолков подзон размерного квантования валентной зоны от толщины слоя германия в гетероструктуре $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$, псевдоморфно выращенной на германии. Из рисунка видно, что при малых толщинах слоя германия ($L < 20 \text{ \AA}$) ближе к зоне проводимости располагается первая подзона легких дырок, а при больших ($L > 20 \text{ \AA}$) — первая подзона тяжелых дырок. Происходит это благодаря деформации, в результате которой потолок зоны тяжелых дырок в твердом растворе располагается ниже, чем потолок зоны легких дырок (т.е. для тяжелых дырок яма глубже). Поэтому с уменьшением L уровни тяжелых дырок сильнее выталкиваются из квантовых ям.

Группа симметрии гамильтониана, описывающего движение дырок в гетероструктуре, — D_{3d} . Она содержит инверсионную ось 6-го порядка, которая

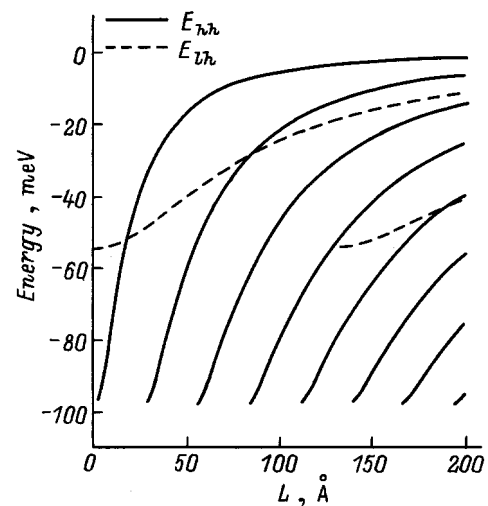


Рис. 2. Зависимости энергий потолков подзон размерного квантования валентной зоны от толщины германия в гетероструктуре $\text{Ge}_{0.88}\text{Si}_{0.12}/\text{Ge}$, псевдоморфно выращенной на германии ($a_{\parallel} = 5.65 \text{ \AA}$). Сплошные кривые соответствуют тяжелым дыркам, пунктир — легким.

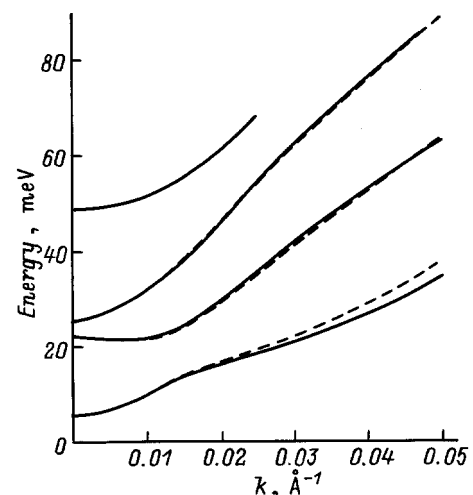


Рис. 3. Зависимости энергии дырок от волнового вектора вдоль слоя германия в гетероструктуре $\text{Ge}_{0.88}\text{Si}_{0.12}/\text{Ge}$, псевдоморфно выращенной на германии. Сплошным линиям соответствует направление волнового вектора вдоль $[11\bar{2}]$, а пунктирным — вдоль направления, которое получается из $[11\bar{2}]$ поворотом вокруг $[111]$ на угол $\pi/6$. Толщина слоя $\text{Ge} = 100 \text{ \AA}$.

параллельна направлению квантования движения. А спектр дырок вырожден по четности по отношению к отражению в плоскости роста [13]. Поэтому группа симметрии изоэнергетических поверхностей дырок — D_{6h} и они инвариантны по отношению к повороту вокруг оси $[111]$ на угол $\pi/3$. На рис. 3 изображены зависимости энергии дырок на уровнях размерного квантования от волнового вектора вдоль слоя германия в гетероструктуре $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$, псевдоморфно

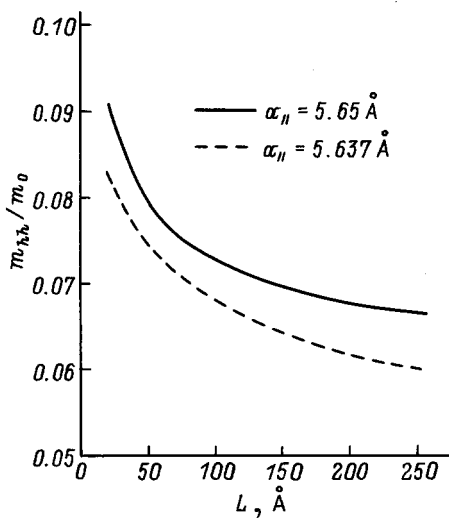


Рис. 4. Зависимость массы тяжелых дырок на дне первой подзоны размерного квантования m_{hh} от толщины слоя германия в гетероструктуре $\text{Ge}_{0.88}\text{Si}_{0.12}/\text{Ge}$ при различных $a_{||}$.

выращенной на германии. Сплошным линиям соответствует направление волнового вектора вдоль $[11\bar{2}]$, а пунктирным — вдоль направления, которое получается из $[11\bar{2}]$ поворотом вокруг $[111]$ на угол $\pi/6$. Толщина слоя Ge — 100 Å. Из рисунка видно, что спектры дырок непараболичны и почти изотропны. Характерный масштаб по энергии для непараболичности — расстояние между подзонами. Четвертый уровень при $k \approx 0.025 \text{ \AA}^{-1}$ выходит в непрерывный спектр.

Вблизи точки $p = 0$, где p квазиимпульс дырки в плоскости роста, закон дисперсии дырок имеет вид $\varepsilon = p^2/2m$. Масса m зависит от деформации и от толщины слоя германия L , а также от x в твердом растворе. Пользуясь теорией возмущения по величине кинетической энергии дырок вдоль слоя, можно получить следующую формулу для массы тяжелых дырок m_{hh} в первой подзоне бесконечно глубокой ямы при $p = 0$:

$$m_0/m_{hh} = A + \frac{D}{\sqrt{12}} + 64 \left(2B^2 + \frac{D^2}{3} \right) \sum_{l=1}^{\infty} \left\{ \frac{l^2}{(4l-1)^2} \times \frac{1}{\pi^2 \left[\left(A - \frac{D}{\sqrt{3}} \right) - 4l^2 \left(A + \frac{D}{\sqrt{3}} \right) - 4\sqrt{3}m_0dL^2\varepsilon_{xy}/\hbar^2 \right]} \right\}, \quad (13)$$

A , B и D — постоянные, определяющие спектр дырок [11], m_0 — масса свободного электрона.

На рис. 4 представлены зависимости m_{hh} от толщины слоя германия в первой подзоне размерного квантования для двух гетероструктур $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$, полученные путем численного решения уравнения Шредингера. Постоянная решетки одной из этих

структур $a_{||} = 5.65 \text{ \AA}$, что соответствует недеформированному слою германия. Для другой $a_{||} = 5.637 \text{ \AA}$, что соответствует минимуму упругой энергии в многослойной структуре с равными толщинами германия и твердого раствора. При расчете слои твердого раствора предполагались туннельно-непрозрачными. Из рисунка видно, что деформация слоев германия приводит к уменьшению m_{hh} , а уменьшение толщины слоев германия L — к увеличению m_{hh} . Интересно сравнить значение m_{hh} , приведенные на рис. 4, с полученными из (13). Как видно из (13), в бесконечно глубокой яме m_{hh} не зависит от L в недеформированном германии. Для $a_{||} = 5.65 \text{ \AA}$ из (13) получаем $m_{hh} = 0.059m_0$. Для структуры с $a_{||} = 5.637 \text{ \AA}$ из (13) получаем $m_{hh} = 0.059m_0$ при $L = 20 \text{ \AA}$ и $m_{hh} = 0.0574m_0$ при $L = 250 \text{ \AA}$. Таким образом, для $L > 200 \text{ \AA}$ значения m_{hh} , полученные из (13), с 20% точностью совпадают с рассчитанными путем решения уравнения Шредингера.

Спектры электрона

Как уже отмечалось, дно зоны проводимости в слоях Ge и твердого раствора может располагаться в разных долинах. Причем дно зоны проводимости в слое Ge может располагаться как выше, так и ниже дна зоны проводимости в слое твердого раствора. Причина этого состоит в том, что в зависимости от доли кремния в слое твердого раствора и постоянной решетки в плоскости роста (деформации) Δ , $1L$ - и $3L$ -долины могут располагаться по-разному друг относительно друга как внутри одного слоя, так и в соседних слоях.

Пренебрежем сначала эффектами размерного квантования. При изменении $a_{||}$ от 5.43 \AA до 5.65 \AA в слоях германия $3L$ -долины расположены не выше $1L$ -долины, кроме того, Δ -долины в слое германия расположены всегда выше Δ -долин в слое твердого раствора. Строение зоны проводимости при различных $a_{||}$ и x удобно анализировать, принимая во внимание только нижние долины в каждом из материалов (см. рис. 5). Из рис. 5 видно, что в областях 1, 2, 4 дно зоны проводимости в слое германия располагается ниже дна зоны проводимости в слое твердого раствора (тип 1 модуляции зон), а в областях 3 и 5 — наоборот (тип 2). Отметим, что в областях 1, 2 и 4 дно зоны проводимости в слое германия находится в минимумах $3L$ -долин.

Следует отметить, что рис. 5 носит скорее иллюстративный, качественный характер, т.е. показывает какие ситуации в зоне проводимости в принципе могут быть при различных параметрах гетероструктуры. Это связано, как уже отмечалось, с погрешностью величин (8) и, особенно (7), а также неточностью используемых констант деформационного потенциала и величин разрывов зон (1). Кроме того, при сильных

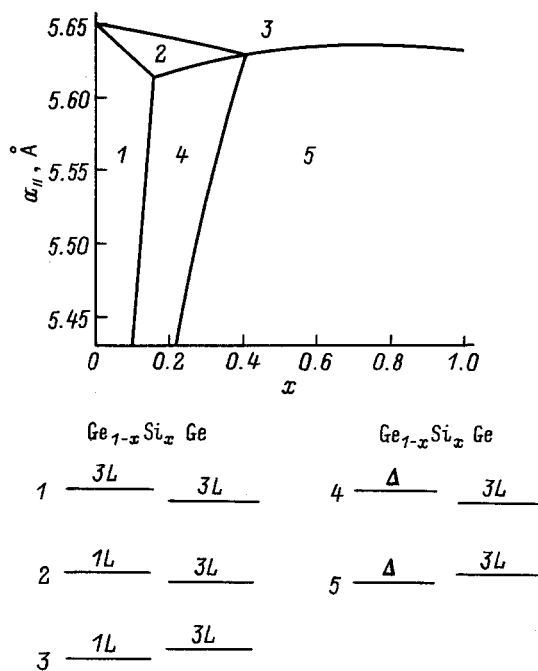


Рис. 5. Границы областей на плоскости $(a_{||}, x)$, в которых нижние долины зоны проводимости в слое германия и твердого раствора располагаются одинаково относительно друг друга. Под рисунком приведено относительное расположение нижних зон в германии и твердом растворе для каждой из областей. Размерное квантование не учитывалось.

деформациях (до 4%), вероятно, существенны нелинейные деформационные эффекты, которые нами не учитывались. Поэтому в действительности границы областей на рис. 5 могут располагаться по-другому и, более того, некоторые области могут отсутствовать или, наоборот, могут существовать другие области с другим строением (в рассматриваемом нами смысле) зоны проводимости. Поэтому ситуация в зоне проводимости требует, разумеется, экспериментального изучения.

В слоях Ge или твердого раствора конечной ширины размерное квантование увеличивает энергию минимумов зоны проводимости. Поэтому оно приводит к изменению границ областей 1–5 и, вообще говоря, к исчезновению некоторых из них или появлению новых.

Расчеты, использующие данные [4] и разность энергий L -долин (7), показывают, что $1L$ -долина в твердом растворе расположена ниже, чем в Ge при любых x и $a_{||}$. Поэтому структура $Ge_{1-x}Si_x/Ge$ может быть прямозонной в импульсном пространстве, однако при этом электроны и дырки будут локализованы в разных слоях (тип 2 модуляции зон). Такая ситуация соответствует области 3 на рис. 5.

Рассмотрим зависимости энергий электронов от двумерных квазиимпульсов в том случае, когда гер-

маний является квантовой ямой. В этом случае, как видно из рис. 5, дно зоны проводимости образовано $3L$ -долинами. Выберем систему координат, в которой оси x , y и z совпадают с кристаллографическими направлениями $[11\bar{2}]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$ и $[111]$ соответственно. Рассмотрим долину, изоэнергетическая поверхность которой в объемном полупроводнике имеет ось вращения вдоль $[11\bar{1}]$. Для нее тензор обратных эффективных масс w_{ij} имеет следующие отличные от нуля компоненты:

$$w_{xx} = \frac{1}{9m_{\perp}} + \frac{8}{9m_{||}}, \quad w_{yy} = \frac{1}{m_{\perp}},$$

$$w_{zz} = \frac{1}{9m_{||}} + \frac{8}{9m_{\perp}}, \quad w_{xz} = w_{zx} = -\frac{2\sqrt{2}}{9} \left(\frac{1}{m_{\perp}} - \frac{1}{m_{||}} \right),$$

где $m_{||}$, m_{\perp} — соответственно продольная и поперечная массы в L -долинах. Приведем выражения для эффективных масс в твердом растворе [5]:

$$m_{||} = (1.76 - 0.18x + 0.12x^2)m_0, \quad m_{\perp} = (0.1 + 0.03x)m_0. \quad (14)$$

Изоэнергетическая поверхность двумерных электронов в рассматриваемой долине представляет собой эллипс. Одна из его полуосей совпадает с проекцией на плоскость (111) оси вращения эллипсоида постоянной энергии соответствующей долины в объемном материале. Для бесконечно глубокой ямы или в случае, когда $m_{||}$ и m_{\perp} одинаковы в квантовой яме и барьере, закон дисперсии в n -й подзоне размерного квантования можно записать в виде

$$E_m(p_x, p_y) = E_n(0, 0) + \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y}, \quad (15)$$

где

$$\frac{1}{m_x} = w_{xx} - \frac{w_{xz}^2}{w_{zz}}, \quad \frac{1}{m_y} = w_{yy}, \quad (16)$$

а w_{ij} соответствуют материалу квантовой ямы.

В глубоких подзонах, расположенных далеко от края квантовой ямы, волновая функция электронов локализована в основном в квантовой яме и закон дисперсии хорошо аппроксимируется соотношениями (15) и (16), где компоненты тензора w_{ij} взяты для материала квантовой ямы. В мелких подзонах, расположенных близко к краю квантовой ямы, электрон с большей вероятностью находится в барьере и его закон дисперсии описывается соотношениями (15) и (16) с компонентами тензора w_{ij} для барьера. Из формул (14) видно, что массы в законе дисперсии (15) должны слабо зависеть от содержания кремния в твердом растворе. Эффективные массы (14) весьма слабо зависят также и от деформации [5]. Для чистого германия $m_x \approx 1.59$ и $m_y \approx 0.1$.

Правила отбора для оптических переходов

В предыдущем разделе было показано, что дно зоны проводимости в гетероструктуре $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$ может располагаться в $3L$ - $1L$ - или в Δ -долинах. В связи с этим возникает вопрос: можно ли, изучая межзонные оптические переходы, определить в какой из долин располагается дно зоны проводимости в гетероструктуре. Мы покажем, что на этот вопрос существует положительный ответ в том случае, если потолок валентной зоны образован подзоной тяжелых дырок.

Будем рассматривать симметричную структуру. Симметричной мы называем структуру, у которой имеется плоскость симметрии в середине слоя германия. Группа симметрии волнового вектора дырок в таких структурах — D_{3d} . Волновые функции тяжелых дырок преобразуются по двузначному представлению $L_4^+ + L_5^+$, а легких — по L_0^+ (обозначения из работы [14]). Компонента импульса, вдоль оси $[111]$ преобразуется по представлению L_1^- , а две его компоненты в плоскости (111) — по представлению L_3^- .

Переходы $hh-1L$

Переходы $hh-1L$ должны наблюдаться в гетероструктурах, для которых $a_{||}$ и x находятся в области 3 рис. 5. Группа волнового вектора $1L$ -электронов — D_{3d} , а представление, по которому преобразуются их волновые функции — L_0^+ . Волновые функции фононов с волновым вектором, соответствующим точке $1L$ зоны Бриллюэна, преобразуются по следующим следующим представлениям [15]: LO — L_1^+ , TO — L_3^- , TA — L_3^+ , LA — L_2^- . Мы используем общепринятые обозначения для фононов: буквы L , T соответствуют продольным и поперечным фононам, а O , A — оптическим и акустическим. Используя стандартный метод [14,15], находим следующие правила отбора для дипольных переходов между подзонной тяжелой дырок и $1L$ -долиной с участием фононов. Как и в объемном германии, переходы с участием LO - и TA -фононов запрещены (по четности). Переходы с участием TO -фононов разрешены при любой поляризации света. Переходы с участием LA -фононов разрешены только для фотонов, у которых отлична от нуля проекция вектора электрического поля \mathbf{E} на плоскость (111) . Запрещены переходы с участием LA -фононов в том случае, когда вектор электрического поля световой волны параллелен направлению $[111]$. Можно показать, что и в несимметричной структуре также запрещен переход $hh-1L$ с участием LA -фонона при $\mathbf{E}||[111]$.

Для структур с квантовыми слоями минимум энергии $1L$ -долины и максимум валентной зоны находятся в одной точке зоны Бриллюэна. Однако дипольные

оптические переходы без рассеяния из подзон легких и тяжелых дырок в $1L$ -долину запрещены. Дело в том, что волновые функции электронов и дырок четные по отношению к инверсии (на это указывают верхние индексы $+$ у представлений), а дипольные переходы запрещены между состояниями с одинаковыми четностями. Строго говоря, эти рассуждения несправедливы для переходов с изменением номера уровня размерного квантования (например, для переходов из второй подзоны размерного квантования дырок в первую подзону $1L$ -долины). Объясняется это тем, что волновые функции в подзонах размерного квантования с четными номерами являются нечетными по отношению к инверсии, т.е. волновые функции электронов и тяжелых дырок в четных подзонах преобразуются по представлениям L_0^- и $L_4^- + L_5^-$ соответственно. Отметим, что в этом случае снимается также и правило запрета для переходов с участием LO - и TA -фононов.

Переходы $hh-3L$

Переходам $hh-3L$ соответствуют области 1, 2, 4 на рис. 5. Группа волнового вектора $3L$ -долин — C_{2h} . Волновые функции электронов преобразуются по представлениям $B_1^+ + B_2^+$ (см. Приложение). Волновые функции фононов с волновым вектором, соответствующим точке $3L$ зоны Бриллюэна, преобразуются по следующим представлениям: LO — A_1^+ , TO — $A_1^- + A_2^-$, TA — $A_1^+ + A_2^+$, LA — A_1^- . Здесь разрешены дипольные переходы с участием LA - и TO -фононов при любой поляризации света.

Таким образом, для фононов с $\mathbf{E}||[111]$ разрешены переходы $hh-3L$ с участием LA -фононов и запрещены переходы $hh-1L$. Интересно определить, через какие промежуточные состояния происходят эти разрешенные переходы. Оказывается, что они идут через состояния $L_4^- + L_5^-$ и $B_1^- + B_2^-$. Промежуточное состояние $L_4^- + L_5^-$ произошло из состояния Γ_8 зоны проводимости объемного германия, а $B_1^- + B_2^-$ — из состояний $L_5^- + L_4^-$ валентной. Наиболее вероятным будет переход через последнее состояние, поскольку оно наиболее близко по энергии к исходному состоянию в валентной зоне. В объемном германии излучательные переходы с участием LA -фононов идут в основном через промежуточное состояние в зоне проводимости Γ_7^- [16]. В гетероструктуре этим переходам соответствуют переходы под влиянием компонент электрического поля, лежащих в плоскости (111) , через промежуточное состояние L_0^- , которое произошло из Γ_7^- . Вероятность перехода через состояние L_0^- больше, чем через состояние $B_1^- + B_2^-$, поскольку для него меньше разность энергий начального и промежуточного состояний. Поэтому интенсивность переходов $hh-3L$ с участием LA -фононов и $\mathbf{E}||[111]$ меньше, чем для переходов под влиянием $\mathbf{E} \perp [111]$.

Переходы $hh-\Delta$

Этим переходам соответствует область 5 на рис. 5. Группа симметрии волнового вектора Δ -долин — σ . Волновые функции электронов преобразуются по представлению $B_1 + B_2$ (см. Приложение). Волновые функции TO - и TA -фононов преобразуются по представлениям A_2 , а LA - и LO -фононов — по A_1 . Симметрия разрешает оптические переходы с участием любых фононов с любой поляризацией световой волны. Однако как в объемном кремнии [15], так и в твердом растворе, когда дно зоны проводимости располагается в Δ -долинах, наблюдаются оптические переходы только с участием TA - и TO -фононов [1,10]. Отсутствие переходов с участием продольных фононов не связано с правилами запрета, т.е. с симметрией [15]. Поэтому и в гетероструктуре $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$, в которой дно зоны проводимости находится в Δ -долинах, будут наблюдаться переходы только с участием поперечных фононов.

Заключение

Резюмируя приведенные выше результаты, сформулируем, как из оптических исследований гетероструктуры $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$ определить состояния какой долины образуют в ней дно зоны проводимости. Если дно зоны проводимости образовано состояниями Δ -долин, тогда преобладают излучательные переходы с испусканием TO -фононов. В случае, когда дно зоны проводимости образовано состояниями какой-либо L -долины, преобладают излучательные переходы с испусканием LA -фононов [17]. Энергии TO -фононов, соответствующих связям $\text{Ge}-\text{Ge}$, $\text{Ge}-\text{Si}$, $\text{Si}-\text{Si}$, хорошо известны [1]. Поэтому, сравнивая энергии бесфононных переходов с участием фононов, можно отличить переходы из Δ -долин от переходов из L -долин. Для того чтобы отличить переходы из $1L$ -долины от переходов из $3L$ -долин, необходимо исследовать поляризацию излучения. Переходы с участием LA -фононов и $\mathbf{E} \parallel [111]$ запрещены для $1L$ -долины и ослаблены для $3L$ -долин.

Конечно, существуют и более прямые методы для определения типа нижней долины зоны проводимости. Например, измерение массы электронов вдоль слоев при наблюдении циклотронного резонанса. Однако такие измерения требуют очень высокого качества структур. Требования к качеству структур для наблюдения люминесценции значительно ниже и поэтому предлагаемый здесь подход может оказаться более приемлемым.

Авторы считают своим долгом выразить благодарность Ю.А. Романову, Л.К. Орлову, В.И. Гавриленко, Н.Г. Калугину и М.Д. Молдавской за полезные дискуссии. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследова-

ований (гранты 93-02-1.1721, 95-02-05863), а также Международного научного фонда и Российского правительства (грант R8H300).

Приложение

Характеры неприводимых представлений двойных групп C_{2h} и σ . Обозначения для элементов симметрии взяты из [18]

Таблица 1. C_{2h}

	E	Q	C_2	QC_2	σ	$Q\sigma$	I	QI
A_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1
A_2^+	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
A_1^-	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
A_2^-	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
B_1^+	1	-1	i	$-i$	i	$-i$	1	$-i$
B_2^+	1	-1	$-i$	i	$-i$	i	1	-1
B_1^-	1	-1	i	$-i$	$-i$	i	-1	1
B_2^-	1	-1	$-i$	i	i	$-i$	-1	1

Таблица 2. σ

	E	Q	σ	$Q\sigma$
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	i	$-i$
B_2	1	-1	$-i$	i

Список литературы

- [1] D.J. Robbins, L.T. Canham, S.J. Barnet, A.D. Pitt, P. Calcott. *J. Appl. Phys.*, **71**, 1407 (1992).
- [2] H. Yaguchi, K. Tay, K. Takemasa, K. Onabe, R. Ito, Y. Shiraki. *Phys. Rev. B*, **49**, 7394 (1994).
- [3] Л.К. Орлов, О.А. Кузнецов, Р.А. Рубцова, А.Л. Чернов, В.И. Гавриленко, О.А. Миронов, В.В. Никоноров, И.Ю. Скрылев, С.В. Чистяков. *ЖЭТФ*, **98**, 1028 (1990).
- [4] C.G. Van de Walle, R.M. Martin. *Phys. Rev. B*, **34**, 5621 (1986).
- [5] M.M. Rieger, V. Vogl. *Phys. Rev. B*, **48**, 14 276 (1993).
- [6] S. Fukatsu, Y. Shiraki. *Appl. Phys. Lett.*, **63**, 2378 (1993).
- [7] T. Baier, U. Mantz, K. Tronke, R. Sauer, F. Schäffler, H.-J. Herzog. *Phys. Rev. B*, **50**, 15 191 (1994).
- [8] T.P. Pearsall, J. Berk, L.C. Feldman, J.M. Bonar, J.P. Mannaerts. *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 729 (1987).
- [9] J.P. Dismukes, L. Ekstrom, R.J. Paff. *J. Phys. Chem.*, **68**, 3021 (1964).
- [10] J. Weber, M.I. Alonso. *Phys. Rev. B*, **40**, 5683 (1989).
- [11] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972) с. 393.
- [12] В.Я. Алешкин, Н.А. Бекин. *ЖЭТФ*, **105**, 1396 (1994).

- [13] В.Я. Алешкин, Ю.А. Романов. *ЖЭТФ*, **95**, 149 (1989).
- [14] Ф. Бассани, Дж. Пастори Парравичини. *Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах* (М., Наука, 1982) с. 65.
- [15] Р. Нокс, А. Голд. *Симметрия в твердом теле* (М., Наука, 1970) с. 390.
- [16] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *ФТТ*, **17**, 696 (1975).
- [17] Н.Г. Калугин, Л.К. Орлов, О.А. Кузнецов. *Письма ЖЭТФ*, **58**, 197 (1993).
- [18] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика*, т. 3. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., Наука, 1989) с. 418.

Редактор В.В. Чалдышев

Electron and hole spectra and selection rules for optical transitions in a $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$

Y.Ya. Aleshkin, N.A. Bekin

Institute for Physics of Microstructures,
Russian Academy of Sciences,
603600 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract Electron and hole spectra in strained $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$ heterostructures grown on (111) plane have been investigated. We have shown that conduction band structure may be determined by studying the photoluminescence polarization. Selection rules for indirect optical transitions have been found.