

## РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$ СТРУКТУР С ОДИНОЧНЫМИ КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ

Д. В. Ушаков<sup>а\*</sup>, В. К. Кононенко<sup>а,б</sup>

УДК 535.374:621.375.8

<sup>а</sup> Белорусский государственный университет, 220030, Минск, просп. Независимости, 4; e-mail: UshakovDV@bsu.by

<sup>б</sup> Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск

(Поступила 8 сентября 2010)

На основе 4-зонного  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода проведены численные расчеты энергетических характеристик квантоворазмерных структур  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$  с одиночными квантовыми ямами. Получены аналитические выражения для параметров Латтинджера в зависимости от компонентного состава соединений  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ . В приближении эффективной массы приведены аналитические выражения для энергии  $\hbar\omega$  оптических зона-зонных переходов, которые хорошо согласуются с численными расчетами  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -методом, что позволяет достаточно точно определять пределы изменения  $\hbar\omega$  при варьировании компонентного состава и толщины активных и барьерных слоев.

**Ключевые слова:** система  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$ , одиночная квантовая яма,  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метод, параметры Латтинджера, приближение эффективной массы, энергия оптических переходов.

Numerical calculations of energy characteristics of  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$  quantum-size structures with a single quantum well were carried out on the basis of the four-band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  method. Analytical expressions for the Luttinger parameters are obtained depending on the component composition of  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  compounds. In the effective mass approximation the analytical expressions for the energy  $\hbar\omega$  of the optical band-to-band transitions are given, which are in good agreement with the numerical calculations by the  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  method, that allows one accurately to determine the range of  $\hbar\omega$  changes at varying the component composition and thickness of the active and barrier layers.

**Keywords:**  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$  system, single quantum well,  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  method, Luttinger parameters, effective mass approximation, optical transition energy.

**Введение.** Элементарные полупроводники Si и Ge имеют различные величины постоянной кристаллической решетки. Рассогласование этих значений составляет 4.2 %, поэтому структуры типа  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$  подвержены механическим напряжениям. При  $x < 0.85$  структуры  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$  проявляют свойства Si, а при  $x > 0.85$  — Ge, что соответствует резкому изменению характера зависимости ширины запрещенной зоны соединений  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$  от компонентного состава. Следует отметить, что подвижность носителей заряда — электронов и дырок — в Ge гораздо больше, чем в Si, что объясняется меньшими значениями эффективных масс электронов и дырок. Поэтому использование составных соединений  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  позволяет увеличить быстродействие оптоэлектронных приборов и создать новые приборы, работающие в средней и дальней ИК областях.

Интегрирование соединений  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  при создании электронных и фотонных приборов — одно из современных направлений полупроводниковой техники. Применение кремниевой технологии удешевляет производство и расширяет функциональные возможности интегральных микро- и оптокомпонентов. Например, попытки получения эффективных оптических переходов

## CALCULATION OF ENERGY CHARACTERISTICS OF $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$ STRUCTURES WITH SINGLE QUANTUM WELLS

D. V. Ushakov<sup>а\*</sup> and V. K. Kononenko<sup>а,б</sup> (<sup>а</sup> Belarusian State University, 4 Nezavisimosti Ave., Minsk, 220030, Belarus; e-mail: UshakovDV@bsu.by; <sup>б</sup> B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus, Minsk)

в непрямозонном полупроводнике Ge путем сильного легирования кристалла атомами Р или под действием растягивающих напряжений привели к заметному свечению структуры Ge–Si и даже оптическому усилению на длинах волн вблизи 1.6 мкм при комнатной температуре и стационарной оптической накачке [1].

В настоящей работе в рамках 4-зонного  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода определена зонная структура квантово-размерной системы  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$ . Полученные данные и аналитические выражения для энергии  $\hbar\omega$  оптических зона-зонных переходов позволяют достаточно точно определять пределы изменения  $\hbar\omega$  при варьировании компонентного состава и толщины активных и барьерных слоев.

**Расчет  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -методом.** Спектральные характеристики квантоворазмерных гетероструктур определяются энергетической структурой зоны проводимости и валентной зоны активного слоя. При расчете спектральных характеристик гетероструктур с одномерным ограничением широко используется приближение эффективной массы. В этом случае дисперсионные кривые зоны проводимости и валентной зоны описываются квадратичным законом:

$$E(\mathbf{k}) = E_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad (1)$$

где  $E_n$  — начальный уровень энергии;  $m$  — эффективная масса носителей заряда;  $\mathbf{k}$  — волновой вектор носителей.

Однако в реальных гетероструктурах закон дисперсии носителей заряда, прежде всего дырок, отличается от параболического вида. Это в первую очередь связано с наличием взаимодействия между энергетическими подзонами валентной зоны. Размерное квантование увеличивает степень взаимодействия валентных  $p$ -оболочек, формирующих подзоны тяжелых и легких дырок, вследствие чего дисперсионные зависимости для квантоворазмерных гетероструктур приобретают ярко выраженную непараболичность. В этом случае подзоны валентной зоны некорректно классифицировать на подзоны легких и тяжелых дырок, так как каждая подзона — результат смешения орбиталей, формирующих подзоны дырок обоих типов.

Для расчета энергетической структуры зон и волновых функций носителей заряда с учетом эффекта смешения зон успешно применяется  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метод [2—7]. В приближении 4-зонного  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода энергии уровней подзон  $E_n$  и огибающие волновые функции находятся из решения стационарного уравнения Шредингера [8] с гамильтонианом размерностью  $4 \times 4$ :

$$\sum_{v'} [H_{vv'} + V(z)\delta_{vv'}] f_n^{v'}(\mathbf{k}_{\parallel}, z) = E_n(\mathbf{k}_{\parallel}) f_n^v(\mathbf{k}_{\parallel}, z). \quad (2)$$

Здесь  $V(z)$  — профиль потенциальной энергии в валентной зоне;  $H_{vv'}$  — гамильтониан Латтинджера и Кона с магнитными квантовыми числами  $v, v' = 3/2, -1/2, 1/2, -3/2$ ;  $f_n^v$  — огибающая функция;  $\mathbf{k}_{\parallel}$  — волновой вектор в плоскости, перпендикулярной оси размерного квантования  $z$ . Выражение для гамильтониана  $H_{vv'}$  в базисе  $|3/2, 3/2\rangle, |3/2, -1/2\rangle, |3/2, 1/2\rangle, |3/2, -3/2\rangle$  с учетом энергии упругих напряжений  $\zeta$  имеет вид [9—12]:

$$H_{vv'} = \begin{bmatrix} P+Q+\zeta & R & -S & 0 \\ R^* & P-Q-\zeta & 0 & S \\ -S^* & 0 & P-Q-\zeta & R \\ 0 & S^* & R^* & P+Q+\zeta \end{bmatrix}, \quad (3)$$

где

$$P = \frac{\hbar^2}{2m_e} \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad Q = \frac{\hbar^2}{2m_e} \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \quad (4)$$

$$S = \frac{\hbar^2}{2m_e} 2\sqrt{3}\gamma_3 (k_x - ik_y)k_z, \quad R = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sqrt{3} (\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y),$$

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  — параметры Латтинджера;  $m_e$  — масса электрона;  $k_x, k_y, k_z$  — компоненты волнового вектора.

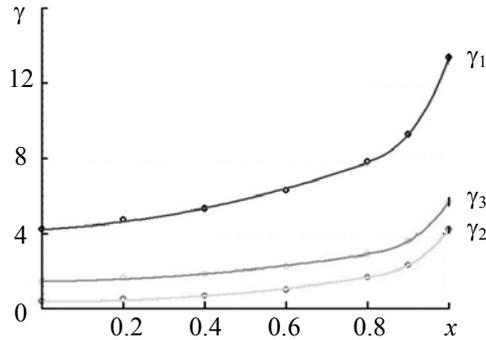


Рис. 1. Параметры Латтинджера  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  и  $\gamma_3$  в зависимости от компонентного состава соединений  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , рассчитанные по формулам (5)–(7) (сплошные линии), в сравнении с результатами работы [13] (точки)

Анизотропия энергетического спектра дырок вблизи потолка валентной зоны полностью характеризуется известными зонными параметрами Латтинджера  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ ,  $\gamma_3$ . Для различного компонентного состава соединений  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  на основе детального теоретического анализа параметры Латтинджера рассчитаны в работе [13]. С использованием результатов этой работы нами получены следующие интерполяционные формулы

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 4.22 + 1.234x + 3.988x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.8, \\ \gamma_1 &= -104.315 + 447.266x - 601.113x^2 + 271.542x^3, \quad 0.8 \leq x \leq 1.0, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \gamma_2 &= 0.39 - 0.185x + 2.203x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.8, \\ \gamma_2 &= -58.16 + 238.533x - 318.8x^2 + 142.667x^3, \quad 0.8 \leq x \leq 1.0, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \gamma_3 &= 1.44 + 0.266x + 1.928x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.8, \\ \gamma_3 &= -59.740 + 250.855x - 336.675x^2 + 151.250x^3, \quad 0.8 \leq x \leq 1.0, \end{aligned} \quad (7)$$

Как видно из рис. 1, расчеты по интерполяционным формулам (5)–(7) отлично совпадают с результатами [13].

Постоянная решетки (в нм) в зависимости от компонентного состава рассчитывалась, как в [14]:

$$a(x) = 0.541(1-x) + 0.5658x - 0.00188(1-x)x. \quad (8)$$

Ширина запрещенной зоны  $E_{g0}$  (в эВ) при изменении состава соединения  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  зависит (при 0 К) от  $x$  согласно [15]:

$$\begin{aligned} E_{g0} &= 1.17 - 0.43x + 0.206x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.85, \\ E_{g0} &= 2.14127 - 1.39757x, \quad 0.85 \leq x \leq 1.00. \end{aligned} \quad (9)$$

Тогда с использованием параметров Варшни ( $\alpha$ ,  $\beta$ ) зависимость ширины запрещенной зоны соединения от температуры имеет вид

$$E_g = E_{g0} - \alpha \frac{T^2}{T + \beta} \quad (10)$$

Рассчитанные по (9) и (10) значения (при  $T = 300$  К) постоянной кристаллической решетки и ширины запрещенной зоны для системы  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  с разным компонентным составом  $x$  представлены в табл. 1. Значения  $\alpha$  и  $\beta$  для разных  $x$  получены путем линейной интерполяции данных для элементарных полупроводников Si и Ge.

В случае напряженной квантоворазмерной гетероструктуры (например, при выращивании  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  с постоянной решетки  $a(x)$  на подложке Si с постоянной решетки  $a_0$ ) энергия упругого напряжения  $\zeta$  в гамильтониане (3) может быть выражена через тензор деформаций  $\varepsilon$ . В случае однородно биаксиально сжатого квантоворазмерного слоя компоненты тензора деформаций [16]:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_0 - a(x)}{a(x)} = \varepsilon, \quad \varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon, \quad \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0.$$

Т а б л и ц а 1. Постоянная решетки и ширина запрещенной зоны

Параметры	Si	Si <sub>0.9</sub> Ge <sub>0.1</sub>	Si <sub>0.8</sub> Ge <sub>0.2</sub>	Si <sub>0.7</sub> Ge <sub>0.3</sub>	Si <sub>0.6</sub> Ge <sub>0.4</sub>	Si <sub>0.5</sub> Ge <sub>0.5</sub>	Ge
$a_0$ , нм	0.541	0.543	0.546	0.548	0.550	0.553	0.566
$E_{g0}$ , эВ	1.170	1.129	1.092	1.060	1.031	1.007	0.744
$E_g$ (300 К), эВ	1.125	1.081	1.042	1.007	0.976	0.948	0.663
$\alpha$ , мэВ/К	0.473	0.473	0.474	0.474	0.475	0.475	0.477
$\beta$ , К	636.0	595.9	555.8	515.7	475.6	435.5	235.0

Здесь  $C_{11}$  и  $C_{12}$  — модули упругости. При этом энергия напряжения  $\zeta$  и профиль потенциальной энергии дырок в валентной зоне  $V_h(z)$  следующие [17]:

$$\zeta = -b(1 + 2C_{12}/C_{11})\varepsilon,$$

$$V_h(z) = \begin{cases} 2a_v(1 - C_{12}/C_{11})\varepsilon, & |z| < d/2, \\ \Delta E_v, & |z| \geq d/2, \end{cases}$$

где  $a_v$ ,  $b$  — деформационные потенциалы валентной зоны;  $\Delta E_v$  — высота потенциального барьера;  $d$  — ширина квантовой ямы (начало отсчета по оси  $z$  совмещено с центром квантовой ямы).

Рассмотрим, как описывается разрыв энергий валентной зоны на гетерогранице Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-Si<sub>1-y</sub>Ge<sub>y</sub>. В [18] получена формула для нахождения разрыва энергии валентной зоны для тяжелых дырок на гетерогранице, если Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> псевдоморфно выращен на плоскости (001) буфера Si<sub>1-y</sub>Ge<sub>y</sub>:

$$\Delta E_{vh}(x) = (0.74 - 0.06y)(x - y). \quad (11)$$

Разрыв зоны легких дырок, согласно [18, 19]:

$$\Delta E_{vl}(x) = \Delta E_{vh}(x) - \frac{\Delta}{2} - \frac{3b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta^2 - 2b\Delta(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz}) + 9b^2(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})^2}. \quad (12)$$

Как видно из (12), потолок валентной зоны тяжелых дырок лежит выше потолка валентной зоны легких дырок на  $\Delta E_{vh} - \Delta E_{vl}$ .

Для эффективного численного расчета зонной структуры полупроводника гамильтониан  $H$  преобразуется с помощью унитарного преобразования к блочно-диагональному виду [17, 20]:

$$UHU^\dagger = \begin{bmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{bmatrix},$$

где

$$H^{U,L} = \begin{bmatrix} P \pm Q & \tilde{R} \\ \tilde{R}^\dagger & P \mp Q \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} \alpha^* & 0 & 0 & -\alpha \\ 0 & \beta^* & -\beta & 0 \\ 0 & \beta^* & \beta & 0 \\ \alpha^* & 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix},$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp i(3\pi/4 - 3\phi/2), \quad \beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp i(-\pi/4 + \phi/2), \quad \phi = \text{ctg}(k_y/k_x),$$

$\tilde{R} = |R\rangle - i|S\rangle$ ,  $H^U$  соответствует верхний знак элементов определителя. Так как матрицы  $H^U$  и  $H^L$  имеют одинаковые собственные значения, для нахождения энергий уровней подзон валентной зоны можно перейти от уравнения Шредингера (2), представляющего систему четырех уравнений с переменными  $\mathbf{k}_\parallel$  и  $z$ , к системе двух уравнений.

Пусть ось  $z$  направлена по нормали к квантоворазмерным слоям. Тогда  $k_z$  можно заменить на оператор  $-i\partial/\partial z$  и для нахождения энергий уровней подзон  $E_n$  и соответствующих им огибающих функций необходимо решить уравнение Шредингера, записываемое в виде

$$(H^j(\mathbf{k}_\parallel, -i\partial/\partial z) + (V(z) - E_n)I)F_n^j(z) = 0, \quad (13)$$

где  $j = U$  или  $L$ ;  $I$  — единичная матрица 2-го ранга;  $F_n^U(z) = \begin{pmatrix} f_n^{3/2}(z) \\ f_n^{-1/2}(z) \end{pmatrix}$ ,  $F_n^L(z) = \begin{pmatrix} f_n^{1/2}(z) \\ f_n^{-3/2}(z) \end{pmatrix}$ .

Система (13) решалась с помощью метода конечных элементов [21, 22], позволяющего с высокой точностью находить собственные значения энергии и волновые функции для многослойных квантоворазмерных гетероструктур со сложным потенциальным профилем при меньших вычислительных затратах по сравнению с другими известными методами. При этом область, в которой ищется решение, разбивается на  $N$  интервалов. В каждом интервале искомая функция представляется в виде

$$F(z) = n_1 F_i + n_2 F'_i + n_3 F_{i+1} + n_4 F'_{i+1},$$

где  $F_i, F'_i$  — значения функции  $F(z)$  и ее производной в точке  $z_i$ ;  $n_k$  — эрмитовы элементы 3-го порядка [22]. В качестве граничных условий принято равенство нулю функции  $F$  на достаточно большом расстоянии от крайних квантовых ям гетероструктуры. Для сшивки волновых функций на гетерограницах использовались условия непрерывности потока и огибающих волновых функций [23, 24].

В общем случае параметры численного расчета для соединений Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> аппроксимировались по экспериментальным и теоретическим данным [13—18, 25] согласно выражению

$$G_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}(x) = (1-x)G_{\text{Si}} + x G_{\text{Ge}} - x(1-x)b_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}.$$

Здесь вместо  $G$  следует подставлять эффективные массы электронов  $m_c$ , энергию спин-орбитального отщепления  $\Delta S_0$ , энергию Кейна  $E_p$ , деформационный потенциал валентной зоны  $b$ , упругие модули  $C_{11}, C_{12}$ . Характеристики, необходимые для расчета зонной структуры соединений Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>, представлены в табл. 2—4.

На рис. 2—4 приведены профили потенциальных ям, уровни энергии и волновые функции, а также дисперсионные кривые в валентной зоне для квантоворазмерной структуры Si-Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>-Si, рассчитанные на основе 4-зонного  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода (уравнения (2), (3), (13)) для различных ширин

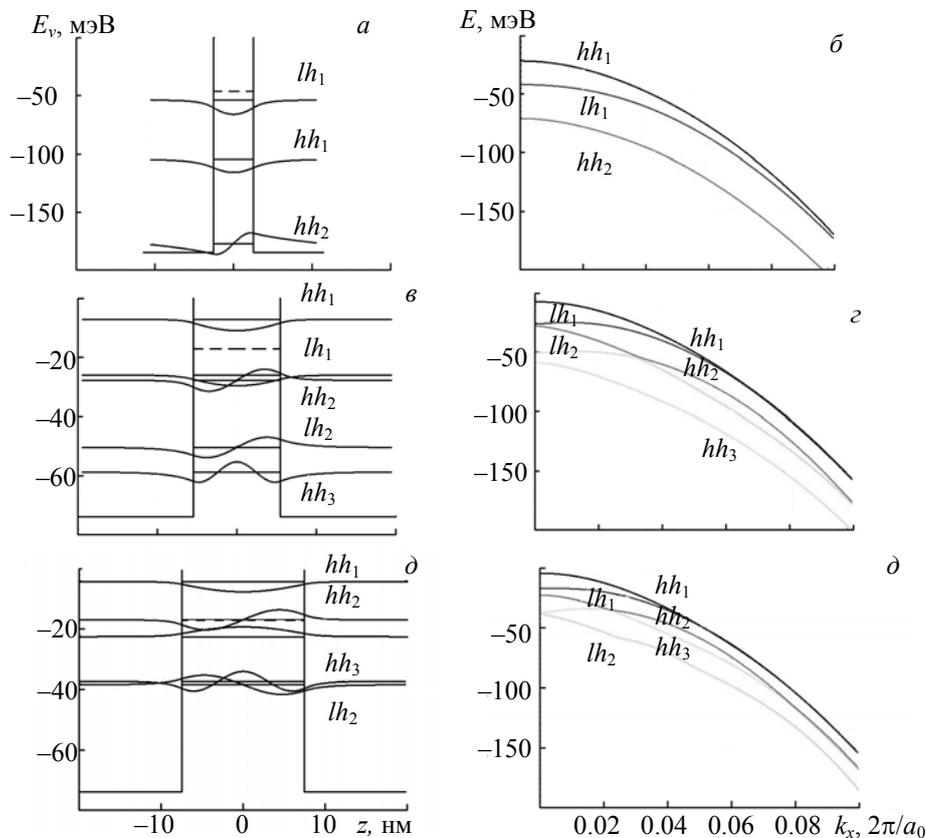


Рис. 2. Профили потенциальных ям, уровни энергии и волновые функции (а, б, д), а также дисперсионные кривые в валентной зоне (б, з, е), рассчитанные на основе 4-зонного  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода, для квантоворазмерной структуры Si-Si<sub>0.9</sub>Ge<sub>0.1</sub>-Si в зависимости от ширины квантовых ям  $d = 5$  (а, б), 11 (в, з) и 15 нм (д, е); штриховая линия — потолок зоны легких дырок

Т а б л и ц а 2. Параметры расчета зонной структуры

Параметры	Si	Si <sub>0,9</sub> Ge <sub>0,1</sub>	Si <sub>0,8</sub> Ge <sub>0,2</sub>	Si <sub>0,7</sub> Ge <sub>0,3</sub>	Si <sub>0,6</sub> Ge <sub>0,4</sub>	Si <sub>0,5</sub> Ge <sub>0,5</sub>	Ge
$\Delta S_0$ , эВ	0.044	0.065	0.086	0.109	0.132	0.157	0.296
$E_p$ , эВ	21.600	22.075	22.550	23.025	23.500	23.975	26.350
$\gamma_1$	4.220	4.383	4.626	4.949	5.352	5.834	13.380
$\gamma_2$	0.390	0.394	0.441	0.533	0.668	0.848	4.240
$\gamma_3$	1.440	1.486	1.570	1.693	1.855	2.055	5.690

Т а б л и ц а 3. Параметры напряжений

Параметры	Si	Si <sub>0,9</sub> Ge <sub>0,1</sub>	Si <sub>0,8</sub> Ge <sub>0,2</sub>	Si <sub>0,7</sub> Ge <sub>0,3</sub>	Si <sub>0,6</sub> Ge <sub>0,4</sub>	Si <sub>0,5</sub> Ge <sub>0,5</sub>	Ge
$b$ , эВ	-2.330	-2.387	-2.444	-2.501	-2.558	-2.615	-2.900
$C_{11}$ , 10 <sup>7</sup> Н/см <sup>2</sup>	1.658	1.620	1.583	1.546	1.509	1.472	1.285
$C_{12}$ , 10 <sup>7</sup> Н/см <sup>2</sup>	0.639	0.624	0.608	0.592	0.577	0.561	0.483

Т а б л и ц а 4. Потенциальные барьеры в валентной зоне и зоне проводимости

Параметры	Si <sub>0,9</sub> Ge <sub>0,1</sub>	Si <sub>0,8</sub> Ge <sub>0,2</sub>	Si <sub>0,7</sub> Ge <sub>0,3</sub>	Si <sub>0,6</sub> Ge <sub>0,4</sub>	Si <sub>0,5</sub> Ge <sub>0,5</sub>	Ge
$\Delta E_{vh}$ , эВ	0.074	0.148	0.222	0.296	0.370	0.740
$\Delta E_{vl}$ , эВ	0.055	0.114	0.175	0.235	0.295	0.588
$\Delta E_c$ , эВ	-0.031	-0.066	-0.105	-0.147	-0.194	-0.279

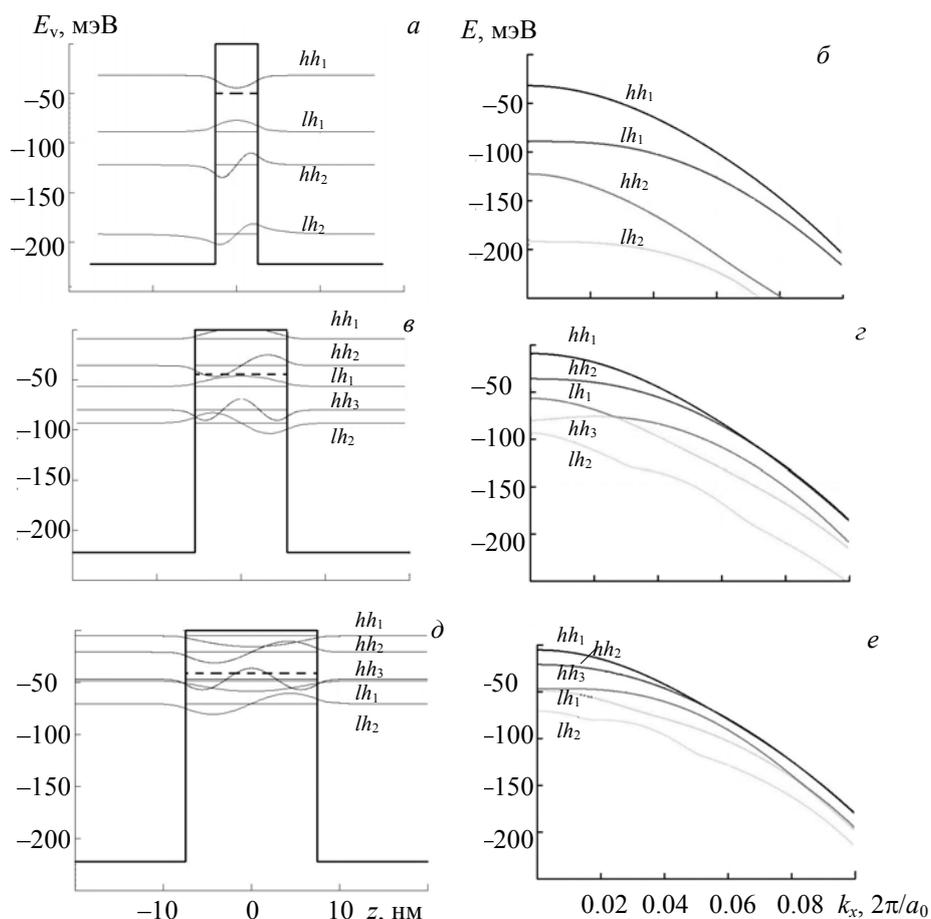


Рис. 3. Профили потенциальных ям, уровни энергии и волновые функции (а, в, д), а также дисперсионные кривые в валентной зоне (б, з, е), рассчитанные на основе 4-зонного  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода, для квантоворазмерной структуры Si-Si<sub>0,7</sub>Ge<sub>0,3</sub>-Si в зависимости от ширины квантовых ям  $d = 5$  (а, б), 11 (в, з) и 15 нм (д, е); штриховая линия — потолок зоны легких дырок

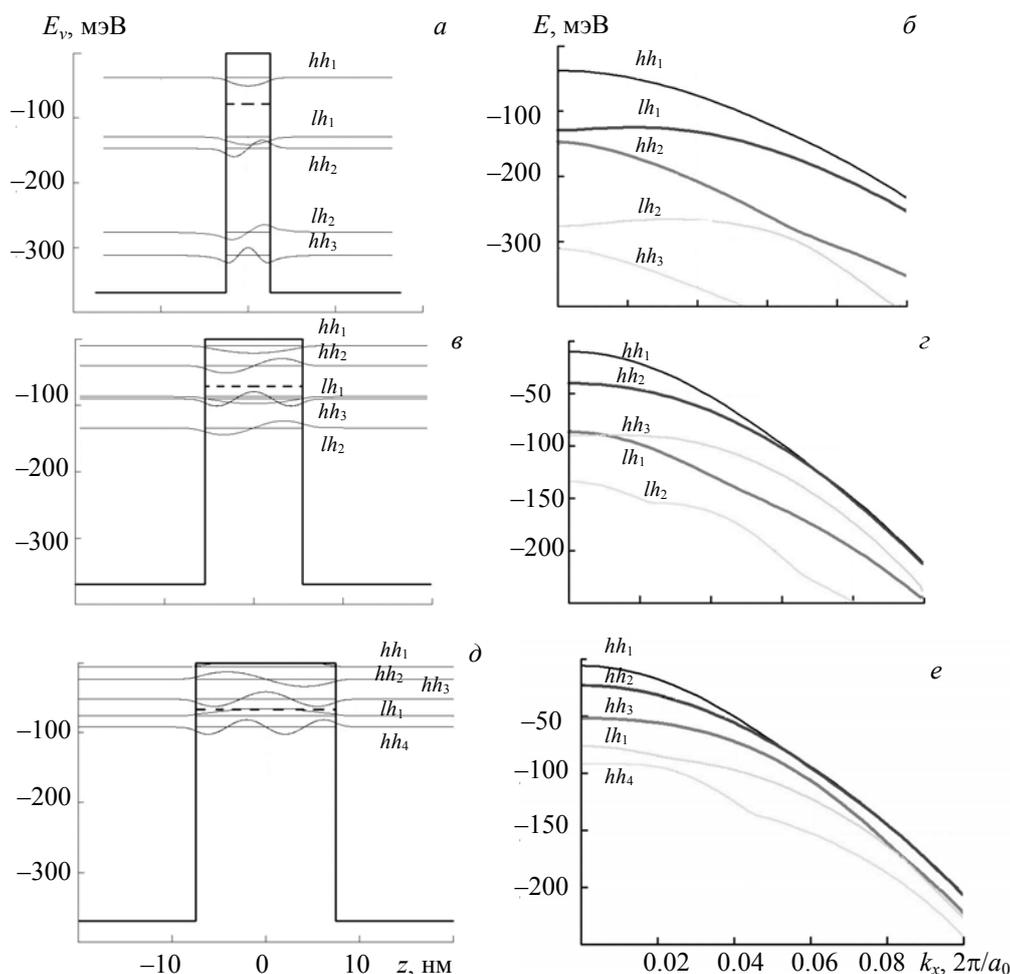


Рис. 4. Профили потенциальных ям, уровни энергии и волновые функции (а, в, д), а также дисперсионные кривые в валентной зоне (б, з, е), рассчитанные на основе 4-зонного  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода, для квантоворазмерной структуры Si-Si<sub>0,5</sub>Ge<sub>0,5</sub>-Si в зависимости от ширины квантовых ям  $d = 5$  (а, б), 11 (в, з) и 15 нм (д, е); штриховая линия — потолок зоны легких дырок

квантовых ям. Отличие дисперсионных кривых от параболического закона наиболее существенно в областях малого различия энергий подзон тяжелых и легких дырок, что объясняется более сильным эффектом смешения зон. Так, для квантоворазмерной структуры Si-Si<sub>0,3</sub>Ge<sub>0,7</sub>-Si непараболичность зон наиболее заметна в случае достаточно широких квантовых ям ( $> 10$  нм) для пар уровней  $hh_2$  и  $lh_1$ , а также  $hh_3$  и  $lh_2$ , что обусловлено сдвигом потолка зоны легких дырок. С ростом содержания Ge глубина потенциальных ям увеличивается, уровни энергии проседают и сближаются, что приводит к еще большей непараболичности.

**Приближение эффективной массы и энергии переходов.** В простейшем случае квантование движения носителей в квантоворазмерной гетероструктуре рассматривается как поведение частицы в прямоугольной потенциальной яме. Положение уровней подзон в квантовых ямах задается продольной массой носителей. В терминах параметров Латтинджера в направлении кристаллографических осей [100] продольный компонент эффективной массы тяжелых дырок (проекция момента импульса  $j_z = \pm 3/2$ )

$$m_{vh} = m_e / (\gamma_1 - 2\gamma_2),$$

компонент для легких дырок (проекция момента импульса  $j_z = \pm 1/2$ )

$$m_{vl} = m_e / (\gamma_1 + 2\gamma_2).$$

В направлениях [110] и [111] получаем

$$m_{v110} = m_e / \left( \gamma_1 \pm \sqrt{\gamma_2^2 + 3\gamma_3^2} \right) \text{ и } m_{v111} = m_e / (\gamma_1 \pm 2\gamma_3),$$

где знак “–” относится к тяжелым дыркам, а “+” — к легким. Поперечные компоненты эффективных масс дырок составляют при этом

$$m_{vht} = m_e / (\gamma_1 + \gamma_2) \text{ и } m_{vlt} = m_e / (\gamma_1 - \gamma_2).$$

Эти значения задают закон дисперсии дырок в плоскости квантоворазмерных слоев и плотность их энергетических состояний. С ними связаны скорость оптических переходов и форма спектров испускания и поглощения.

Для учета изменения эффективных масс носителей с составом соединения  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  использовались интерполяционные формулы (5)—(7) для параметров Латтинджера. Рассчитанные значения эффективных масс для разных соединений  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  представлены в табл. 5.

**Т а б л и ц а 5. Эффективные массы носителей заряда: электронов и дырок**

Параметры	Si	$\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$	$\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$	$\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$	$\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$	$\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$	Ge
$m_c/m_e$	0.050	0.048	0.045	0.043	0.041	0.040	0.027
$m_{vl}/m_e$	0.200	0.193	0.182	0.166	0.150	0.133	0.046
$m_{vh}/m_e$	0.291	0.278	0.267	0.257	0.249	0.242	0.204
$m_{vlt}/m_e$	0.261	0.251	0.239	0.226	0.214	0.201	0.109
$m_{vht}/m_e$	0.217	0.209	0.197	0.182	0.166	0.150	0.057

Поскольку положение уровней подзон в квантовых ямах задается продольными компонентами эффективных масс носителей, то спектральный диапазон для переходов между подзонами с испусканием или поглощением света определяется именно этими значениями. Таким образом, энергии начальных излучательных переходов  $\hbar\omega$  однозначно задаются продольными компонентами эффективных масс и соответствуют максимумам в спектрах люминесценции и усиления (если не рассматривать, в частности, эффекты спектрального уширения).

В квантоворазмерных (сверхрешеточных) структурах необходимо учитывать близость квантовых ям друг к другу. Учет конечной толщины барьерных слоев  $d_b$  показывает, что с уменьшением  $d_b$  состояния в квантовой яме, описываемые четными огибающими волновыми функциями ( $n = 1, 3, \dots$ ), опускаются, а состояния с нечетными волновыми функциями ( $n = 2, 4, \dots$ ) поднимаются. Собственные значения энергии удовлетворяют уравнению [26, 27]:

$$E_{vn} = \frac{E_{vn}^\infty}{n^2} \left( n - \frac{2}{\pi} \text{arcctg} \sqrt{\frac{m_v}{m_{vb}}} \sqrt{\frac{U_0}{E_{vn}} - 1} \frac{e^{kd_b} - (-1)^{n+1}}{e^{kd_b} + (-1)^{n+1}} \right)^2, \quad (14)$$

где  $n$  — квантовые числа подзон;  $m_{vb}$  — эффективная масса носителей в барьерном слое;  $U_0$  — высота потенциального барьера;  $d_b$  — толщина барьерного слоя;  $E_{vn}^\infty = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 2m_v d^2$  определяет положение начальных уровней подзон в случае бесконечно больших потенциальных барьеров;  $d$  — ширина квантовой ямы;  $k = \sqrt{2m_{vb}(U_0 - E_{vn})/\hbar^2}$  характеризует глубину проникновения волновых функций за пределы квантовых ям. Удобно ввести величину  $k_0 = \sqrt{2m_{vb}U_0/\hbar^2}$ , тогда аналитическое приближенное выражение для  $E_{vn}$  примет вид [26, 27]:

$$E_{vn} = E_{vn}^\infty n^2 \left( n + \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{m_{vb}}{m_v}} \sqrt{\frac{E_{vn}^\infty}{U_0}} \frac{e^{k_0 d_b} + (-1)^{n+1}}{e^{k_0 d_b} - (-1)^{n+1}} \right)^{-2}. \quad (15)$$

Ошибка в определении  $E_{vn}$  по формуле (15) при  $E_{vn}^\infty/U_0 \leq 2$  составляет <13%.

Как показывают численные расчеты (см. табл. 4), в зоне проводимости квантоворазмерных гетероструктур на  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  наблюдается слабое размерное ограничение движения электронов и квантовые ямы не возникают. Поэтому формула для энергии начальных излучательных переходов имеет вид

$$\hbar\omega(x) = E_g(x) + E_{\text{vh}}, \quad (16)$$

где для ширины запрещенной зоны  $E_g(x)$  необходимо использовать выражения (9) и (10). Энергия  $E_{\text{vh}}$  соответствует нижнему уровню энергии тяжелых дырок при высоте потенциального барьера  $U_0 = \Delta E_{\text{vh}}$  согласно выражению (11) и табл. 4.

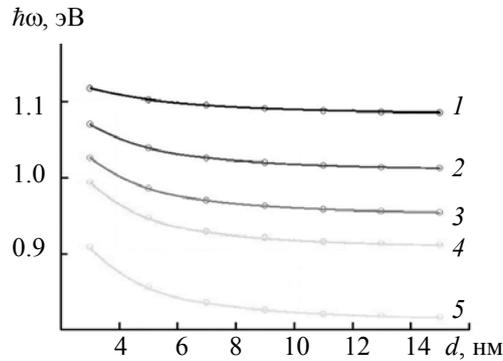


Рис. 5. Зависимость энергии переходов  $\hbar\omega$  квантоворазмерной структуры  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$  от ширины  $d$  квантовой ямы  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  и при различном содержании Ge ( $x = 0.1$  (1), 0.3 (2), 0.5 (3), 0.7 (4) и 0.9 (5)). Сравнение численных расчетов  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -методом (сплошные линии) и по аналитическим формулам (14), (16) (точки)

На рис. 5 представлены зависимости энергии переходов  $\hbar\omega$  для квантоворазмерных структур  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$  от ширины квантовой ямы при различном компонентном составе  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ . Толщина барьерных слоев Si принималась равной  $d_b = 15$  нм. Как видно из расчетов, одна и та же частота излучения может быть реализована в структурах с разным составом активной области путем подбора ширины квантовой ямы  $d$ . Заметнее размерный эффект отражается на частоте излучения при уменьшении ширины квантовой ямы  $d$  и малой эффективной массы дырок  $m_v$ . Расчеты  $\hbar\omega$  по аналитическим формулам (14)—(16) в приближении эффективной массы практически точно совпадают с численными расчетами  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -методом.

**Заключение.** На основе 4-зонного  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -метода проведены расчеты энергетических характеристик квантоворазмерных структур на основе  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{-Si}$ . Аналитические выражения для параметров Латтинджера получены в зависимости от компонентного состава соединений  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ . Показано, что частотой переходов можно управлять, варьируя толщину активного слоя, а также высоту и ширину потенциальных барьеров. Приведенные аналитические выражения для энергии переходов, которые хорошо согласуются с численными расчетами  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -методом, позволяют эффективно определять пределы изменения  $\hbar\omega$ .

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований.

- [1] J.Liu, X.Sun, R.Camacho-Aguilera, L.C.Kimerling, J.Michel. Opt. Lett., **35** (2010) 679—681
- [2] И.М.Цидильковский. Электроны и дырки в полупроводниках. Энергетический спектр и динамика, Москва, Наука (1972)
- [3] E.O.Kane. J. Phys. Chem. Sol., **1** (1957) 249—261
- [4] W.Pötz, W.Porod, D.K.Ferry. Phys. Rev. B, **32** (1985) 3868—3875
- [5] D.L.Smith, C.Mailhiot. Phys. Rev. B, **33** (1986) 8345—8359
- [6] C.Mailhiot, D.L.Smith. Phys. Rev. B, **33** (1986) 8360—8372
- [7] C.Aversa, J.E.Sipe. Phys. Rev. B, **49** (1994) 14542—14549
- [8] S.Seki, T.Yamanaka, W.Lui, Y.Yoshikuni, K.Yokoyama. IEEE J. Quantum Electron., **30** (1994) 500—510
- [9] J.M.Luttinger, W.Kohn. Phys. Rev., **97** (1955) 869—883
- [10] Г.Е.Пикус, Г.Л.Бир. ФТТ, **1** (1959) 1642—1658

- 
- [11] **D.Ahn, S.L.Chuang.** IEEE J. Quantum Electron., **24** (1988) 2400—2406
- [12] **С.В.Наливко, И.С.Манак, А.Л.Чиж.** Литовск. физ. журн., **39** (1999) 365—373
- [13] **T.Fromherz, E.Koppensteiner, M.Helm, G.Bauer, J.F.Nützel, G.Abstreiter.** Phys. Rev. B, **50** (1994) 15073—15085
- [14] **L.F.Yang, J.R.Watling, R.C.W.Wilkins, M.Borici, J.R.Barker, A.Asenov, S.Roy.** Semicond. Sci. Technol., **19** (2004) 1174—1182
- [15] **J.Weber, M.I.Alonso.** Phys. Rev. B, **40** (1989) 5683—5693
- [16] **C.G.Van de Walle.** Phys. Rev. B, **39** (1989) 1871—1883
- [17] **D.Ahn, S.L.Chuang.** IEEE J. Quantum Electron., **30** (1994) 350—365
- [18] **M.M.Rieger, P.Vogl.** Phys. Rev. B, **48** (1993) 14276—14287
- [19] **Q.X.Zhao, M.Willander.** J. Appl. Phys., **86** (1999) 5624—5629
- [20] **S.L.Chuang.** Phys. Rev. B, **43** (1991) 9649—9661
- [21] **J.C.Yi, N.Dagli.** IEEE J. Quantum Electron., **31** (1995) 208—218
- [22] **K.Nakamura, A.Shimizu, M.Koshiba, K.Hayata.** IEEE J. Quantum Electron., **25** (1989) 889—895
- [23] **L.C.Andreani, A.Pasquarello, F.Bassani.** Phys. Rev. B, **36** (1988) 5887—5894
- [24] **S.L.Chuang.** Phys. Rev. B, **40** (1989) 10379—10390
- [25] **D.Rideau, M.Feraille, L.Ciampolini, M.Minondo, C.Tavernier, H.Jaouen, A.Ghetti.** Phys. Rev. B, **74** (2006) 195208(1)—195208(20)
- [26] **V.K.Kononenko, I.S.Zakharova.** Laser Parameters of Quantum-Well Heterostructures, preprint IC/91/63, Trieste, ICTP (1991) 1—26
- [27] **А.А.Афоненко, В.К.Кононенко, И.С.Манак.** Теория полупроводниковых лазеров, Минск, Бел. гос. ун-т (1995) 45—61