

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ГЕРМАНИЯ В СЛОЯХ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x < 0.1$), ВЫРАЩЕННЫХ НА ПОДЛОЖКЕ $\text{Si}(001)$, В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИХ ТОЛЩИНЫ

В. С. Багаев^a, В. С. Кривобок^a, В. П. Мартовицкий^{a}, А. В. Новиков^b*

^a *Физический институт имени П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

^b *Институт физики микроструктур Российской академии наук
603950, ГСП-105, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 5 февраля 2009 г.

С помощью методов высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии и низкотемпературной фотолюминесценции исследовано распределение германия в слоях $\text{Si}(001)/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ в зависимости от их толщины при малой концентрации легирующего элемента ($x < 6\%$). Показано, что концентрация германия возрастает с ростом толщины слоя SiGe с появлением латеральных неоднородностей на его границе с подложным слоем кремния для слоев толщиной 30 нм и более. Эти неоднородности носят ориентированный характер и приводят к появлению анизотропного диффузного рассеяния для системы асимметричных рефлексов (113), (224) SiGe . Люминесценция таких пленок при низких температурах и плотностях возбуждения представляет собой излучение локализованных и делокализованных экситонов, характерное для системы с наличием беспорядка. Обнаруженное неоднородное распределение германия в латеральном направлении связывается с накоплением Ge в приповерхностном слое SiGe и с частичной релаксацией упругих напряжений за счет развития шероховатости поверхности и преимущественным встраиванием атомов Ge в один из склонов неровностей.

PACS: 68.55.ag, 78.55.-m, 61.05.cp, 68.65.Fg

1. ВВЕДЕНИЕ

Эпитаксиальные слои $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ на $\text{Si}(001)$ являются очень перспективными для электронных и оптических применений, поскольку они совместимы с кремниевой технологией. В последние годы интерес к ним многократно возрос из-за возможности получения самоформирующихся квантовых точек непосредственно в процессе гетероэпитаксиального роста [1]. При концентрации германия $x > 0.4$ большие напряжения несоответствия стимулируют рост по механизму Странского–Крастанова, при котором наблюдается переход к островковому росту после нарастания нескольких первых двумерных слоев. Причиной перехода к островковому росту является понижение свободной энергии системы в результате частичной релаксации напряжений несоответствия в центре островков, превышающее прирост свободной

поверхностной энергии из-за потери плоского фронта кристаллизации [2]. Этот выигрыш может составлять до 20% от общей упругой энергии в случае, когда островки огранены плоскостями (105) [3]. При получении пленок $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x > 0.4$) в температурном интервале от 500 до 700 °С, когда поверхностной диффузии атомов вполне достаточно для миграции к оптимальным ростовым позициям, а диффузия в объеме еще незначительна, островковый механизм релаксации напряжений несоответствия начинает реализовываться раньше, чем дислокационный механизм, что и позволяет получать и управлять размерами бездислокационной системы квантовых точек [2]. Поэтому слои $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ рассматриваются еще и как модельные по изучению процессов самоорганизованного гетероэпитаксиального роста.

При меньших концентрациях германия ($x < 0.25$) плоский фронт кристаллизации также может искажаться, но согласно критерию

*E-mail: victormart@yandex.ru

Азаро–Тиллера–Гринфелда существует энергетический барьер для зарождения холмиков, ниже которого проигрыш в величине свободной поверхностной энергии из-за потери плоского фронта кристаллизации уже не компенсируется частичной релаксацией напряжений несоответствия при образовании островков [2]. Однако наблюдение роста пленок $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ с помощью электронной микроскопии *in-situ* показало, что в условиях сжимающих напряжений возможно безбарьерное зарождение холмиков путем слияния нескольких соседних ступеней роста [4, 5]. Сами холмики при этом имеют округлые поверхности с разбросом угла наклона островков от нуля до 11° , причем последний угол соответствует стабильной грани (105). При наличии сжимающих напряжений это объясняется понижением анизотропии свободной поверхностной энергии вблизи ориентации (001) с возможностью постепенной эволюции ступеней роста в холмики, характеризующиеся различными углами наклона [6]. Но по оценкам даже этих авторов при $x < 0.1$ фронт кристаллизации должен оставаться плоским.

В напряженных гетероструктурах $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ с малой концентрацией германия ($x < 0.1$) была обнаружена электронно-дырочная жидкость, пороговая плотность мощности возбуждения и энергия связи которой ниже, чем в объемном твердом растворе того же состава [7]. Поскольку величина упругой энергии возрастает с ростом толщины пленки при одном и том же составе слоя SiGe , возникает вопрос о предельно допустимых толщинах таких пленок и способах релаксации напряжений в них. Если в таких пленках плоский фронт кристаллизации трансформируется в шероховатую ростовую поверхность с неоднородным вхождением германия, то это неизбежно должно сказываться на свойствах экситонов, электронно-дырочной плазмы и электронно-дырочной жидкости в слое SiGe . Другой причиной, влияющей на люминесцентные свойства структур, является качество переходного слоя между пленкой $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ и верхним покровным слоем кремния. Известно, что присутствие дислокаций резко увеличивает взаимную диффузию компонентов, приводя к понижению концентрации германия в центрах островков и размытию состава на границе раздела [8].

В настоящей работе методами высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии и низкотемпературной люминесценции показано, что в пленках $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x < 0.06$) толщиной 6–70 нм происходит постепенное изменение их структурных свойств. С

увеличением толщины пленки возрастает как концентрация германия, так и его латеральная неоднородность на границе слоя SiGe и покровного слоя кремния. Мы полагаем, что обнаруженные латеральные неоднородности связаны с сегрегацией германия на ступенях роста, которые могут объединяться в макроступени для достаточно толстых пленок SiGe . Люминесценция таких пленок при низких температурах и плотностях возбуждения представляет собой излучение локализованных и делокализованных экситонов, характерное для системы с наличием беспорядка. Оценка роли беспорядка и средней концентрации германия в пленках, сделанная на основе анализа спектров низкотемпературной фотолюминесценции, подтверждает результаты рентгеноструктурных исследований.

2. МЕТОДИКИ ИЗМЕРЕНИЙ

Исследуемые образцы были получены методом молекулярно-пучковой эпитаксии при $T = 700^\circ\text{C}$ на подложке Si (001) и состояли из буферного слоя Si , одиночного слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ и покровного слоя Si толщиной 100 нм. Для всех структур использовались подложки КДБ-12 (кремний, легированный бором до удельного сопротивления 12 Ом·см, что соответствует объемной концентрации бора около 10^{15} см^{-3}). Подложка была ориентирована с точностью менее 0.5° относительно плоскости (001). Измерения потоков германия и кремния производились *in-situ* с помощью масс-спектрометра с точностью до 5–10 %.

Структурные исследования проводились на рентгеновском дифрактометре PANalytical X'PERT PRO MRD Extended в нескольких режимах съемки. Записи кривых качения образца на симметричных и асимметричных рефлексах (ω -сканирование), а также фрагментов областей обратного пространства проводились с использованием либо гибридного монохроматора, либо четырехкристального монохроматора в сочетании с рентгеновским зеркалом. Расходимость рентгеновского пучка после гибридного монохроматора ($25''$), представляющего собой сочетание в едином блоке рентгеновского зеркала и двухкристального германиевого монохроматора, примерно вдвое больше, чем расходимость после четырехкристального монохроматора ($12''$). Но интенсивность пучка после гибридного монохроматора примерно в 12 раз выше интенсивности пучка после четырехкристального монохроматора даже при сочетании последнего с рентгеновским зеркалом.

Это позволяет уменьшить время получения двумерных сечений областей обратного пространства и увеличить отношение сигналов пленка/подложка при записи кривых качания тонких пленок, поскольку возрастание расходимости рентгеновского пучка приводит к увеличению интенсивности только пиков тонких пленок из-за узкой кривой отражения совершенного материала подложки ($8''$). Поэтому на первом этапе получались двумерные сечения областей обратного пространства с применением гибридного монохроматора, а лишь затем самые характерные из них записывались с первичным четырехкристальным монохроматором. Экспериментальные кривые качания сравнивались с расчетными кривыми, полученными с помощью программы PANalytical Eritaxu. Поскольку в исследованных образцах присутствуют области диффузного рассеяния от покровного слоя кремния, но не регистрируются области, соответствующие слоям SiGe, была изготовлена специальная штанга, позволяющая приближать детектор со стандартного расстояния равного 320 мм от исследуемого образца до расстояний 170 и 120 мм.

Приближение счетчика импульсов к образцу при исследовании эпитаксиальных слоев толщиной в несколько десятков нанометров, особенно в том случае, когда такие слои в действительности состоят из еще более тонких фрагментов, оправдано по следующим соображениям. Согласно кинематической теории дифракции рентгеновских лучей, хорошо применимой для описания дифракции тонких пленок, ширина дифракционного пика $\Delta(2\theta)$ симметричного рефлекса обратно пропорциональна толщине когерентного слоя материала (L) согласно соотношению Шеррера [9]

$$\Delta(2\theta) = \frac{\lambda}{L \cos \theta}.$$

Поэтому с уменьшением толщины пленки на порядок от 50 нм до 5 нм ширина дифракционного пика по шкале 2θ возрастает от двух десятых до двух градусов, а пиковая интенсивность отражения уменьшается на два порядка. И чем ближе счетчик импульсов, тем выше возможность зафиксировать отражение от сверхтонких фрагментов пленок.

Измерения спектров низкотемпературной фотолюминесценции проводились в парах гелия в диапазоне температур от 5 до 15 К. Источником стационарного возбуждения служил Ar^+ -лазер ($\lambda = 488.0$ нм), излучение которого в зависимости от конкретного эксперимента фокусировалось в пятно диаметром 0.2–5 мм. Для исключения

возможного влияния коллективных эффектов на фотолюминесценцию слоя SiGe [7] в большинстве экспериментов использовались низкие ($W = 15$ мВт/см²) плотности мощности возбуждения. Спектры анализировались монохроматором ИКС-31 с линейной дисперсией 3.2 нм/мм. Для записи спектров использовался германиевый фотоприемник, сигнал с которого регистрировался в режиме синхронного детектирования.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Рентгенодифракционный анализ

На рис. 1 в логарифмическом масштабе приведены кривые качания на рефлексе (004) для пяти исследованных образцов со слоями SiGe толщиной 6, 20, 33, 54 и 70 нм, полученными при одном и том же соотношении элементов в ростовой камере. Для удобства восприятия кривые качания смещены по горизонтальной шкале на угол $-\Delta\varphi$ (меньше 0.4°) разориентации подложки от кристаллографической плоскости (001), чтобы наиболее интенсивные пики от подложки всех кривых совпадали друг с другом, эти кривые также разнесены по вертикальной шкале. На этом рисунке видно, что с ростом толщины слоя SiGe центр тяжести его пика смещается в сторону меньших углов, что свидетельствует о возрастании в нем средней концентрации германия. Для двух наиболее толстых слоев их пики хорошо разделяются с самым интенсивным пиком от подложки, поэтому определение концентрации германия в них

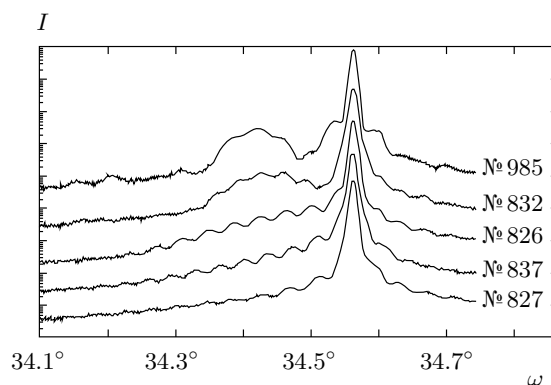


Рис. 1. Кривые качания в логарифмическом масштабе на рефлексе (004) образцов со слоями $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (снизу вверх) толщиной 6, 20, 33, 54 и 70 нм, соответственно, и покровным слоем Si толщиной 100 нм

не представляет труда. В образцах с более тонкими слоями SiGe размытый дифракционный пик от них перекрывается с пиком от покровного слоя кремния (около 100 нм), что приводит к системе спутных максимумов. По угловым расстояниям между этими спутными максимумами определяется суммарная толщина слоя SiGe вместе с покровным слоем кремния. Для вычисления концентрации германия на рефлексе (004) в образцах с тонкими слоями SiGe необходимо знать точную толщину этого слоя. Моделирование расчетных кривых в программе Epitaxу показало, что изменение концентрации германия от 4 до 5 % в слое SiGe толщиной 33 нм приводит примерно к такому же сдвигу пиков, что и увеличение толщины слоя на 5 нм при концентрации германия 4 %. Это вносит некоторую неопределенность в определении состава тонких слоев при использовании лишь одного симметричного рефлекса (004).

Для определения концентрации германия в слоях SiGe толщиной менее 40 нм нами использовались асимметричные рефлексы (224) или (044) с большими углами наклона отражающих плоскостей к ростовой поверхности. На каждом из этих рефлексов можно записать две кривые качания при углах падения рентгеновских лучей на образец $\omega_1 = \theta + \varphi$ и $\omega_2 = \theta - \varphi$, где θ — угол дифракции ($\theta_{(224)} = 44.01^\circ$ и $\theta_{(044)} = 53.35^\circ$ для Si), а φ — угол наклона отражающей плоскости к ростовой поверхности ($\varphi_{(224)} = 35.26^\circ$ и $\varphi_{(044)} = 45^\circ$). Чем больше угол дифракции, тем лучше разрешение между пиками слоя и подложки. Этому помогает также сужение в 6 раз на рефлексе (224) и в 8 раз на рефлексе (044) полуширины кривой качания при большом угле падения ω_1 . Использование асимметричных рефлексов оправдано еще и тем, что помимо определения брэгговского угла дифракции центра пика слоя измеряется также величина относительной разориентации $\Delta\varphi$ между одноименными кристаллическими плоскостями слоя и подложки, возникающей из-за тетрагональной деформации решетки слоя SiGe (см. ниже рис. 5а). Это позволяет определить значения параметра решетки перпендикулярно (a_\perp) и параллельно (a_\parallel) плоскости срастания с подложкой. Последние значения используются для вычисления релаксированного значения параметра решетки a_{relax} , так как линейный закон Вегарда связи параметра элементарной ячейки с составом справедлив для ненапряженной решетки. Поскольку объем кристаллической решетки алмаза не остается постоянным при упругих деформациях, для вычисления релаксированного значения параметра решетки слоя, эпитаксиально выросшего

на подложке (001), используется соотношение из работы [10]:

$$a_{relax} = \frac{c_{11}}{c_{11} + 2c_{12}}(a_\perp - a_\parallel) + a_\parallel,$$

где c_{11} и c_{12} — упругие константы эпитаксиального слоя. Учитывая малую концентрацию германия в исследованных слоях и близкие значения коэффициентов [10],

$$K_{Si} = \frac{c_{11}}{c_{11} + 2c_{12}} = 0.564, \quad K_{Ge} = 0.571,$$

для определения концентрации германия мы использовали значения коэффициента для кремния K_{Si} .

В табл. 1 для всех исследованных образцов приведены значения толщины слоев SiGe, технологическая концентрация германия в них, а также параметры решетки a_\perp и a_\parallel , по которым вычислялись значения a_{relax} . Концентрация германия, определенная по рентгеновским данным, существенно ниже технологической концентрации и возрастает с ростом толщины слоя. Отметим также, что для всех слоев параметр решетки в плоскости роста практически равен параметру решетки подложки, т. е. дислокации на границе раздела отсутствуют.

На кривых качания для симметричного рефлекса (004) на рис. 1 с ростом толщины слоя SiGe заметно подавление интенсивности спутных рефлексов, появляющихся вследствие малой толщины исследованных слоев по сравнению с длиной экстинкции [11]. На расчетных кривых такое подавление наблюдается только при допущении диффузного рассеяния порядка 20–25 % от общей интенсивности рефлекса. Если с ростом толщины слоя SiGe возрастает латеральная неоднородность в распределении германия, тогда эпитаксиально нарастающий поверх нее покровный слой кремния толщиной 100 нм может служить своеобразным усилителем по выявлению этой неоднородности. Первые слои покровного слоя кремния будут сначала повторять рельеф квантовой ямы, а затем постепенно снова делать его плоским, как это наблюдалось на поперечных снимках сверхрешеток Si/SiGe [12].

На рис. 2 для пяти исследованных образцов приведены рефлектометрические кривые, полученные при малых углах падения монохроматизированного пучка рентгеновских лучей на образец. Рефлектометрия широко применяется для определения толщины пленок и шероховатости границ раздела, поскольку интенсивность максимумов на рефлектометрических кривых зависит только от разности в электронных плотностях на границах раздела и уменьшается с возрастанием шероховатости этих

Таблица 1. Структурные данные для квантовых ям SiGe, полученные при анализе кривых качания на асимметричных рефлексах (224) и (044)

№	d , нм	Ge, % (технол.)	a_{\perp} , нм	a_{\parallel} , нм	a_{relax} , нм	Ge, % (рентген)
827	6	5	0.54422	0.54309	0.54373	2.8
837	20	5.2	0.54460	0.54309	0.54386	3.4
826	33	5.4	0.54470	0.54309	0.54400	4.0
832	54	5.4	0.54498	0.54310	0.54416	4.7
985	70	5.8	0.54530	0.54310	0.54434	5.5

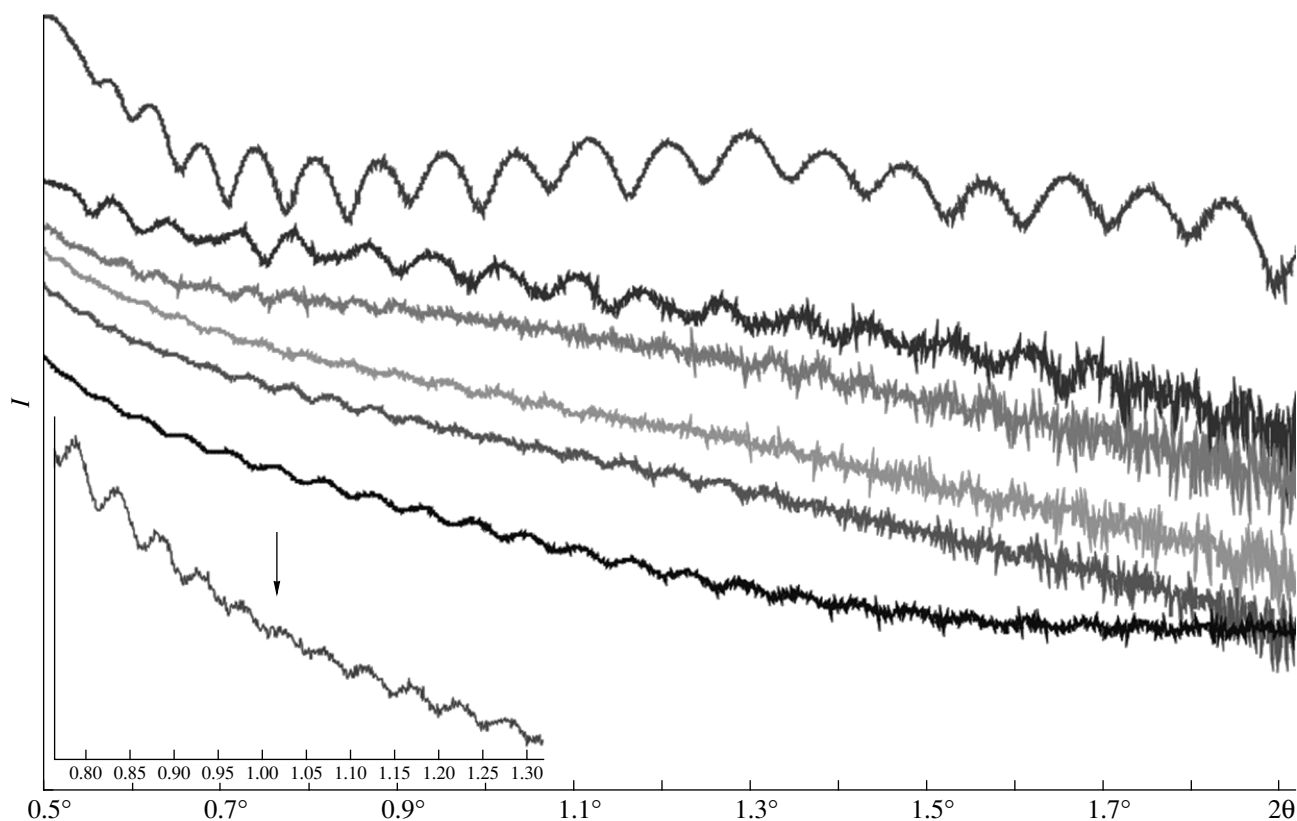


Рис. 2. Рефлектометрические кривые одиночных слоев SiGe толщиной 6, 20, 33, 54 и 70 нм (снизу вверх) с покрывным слоем Si толщиной 100 нм (для разнесения кривые умножены на масштабирующие коэффициенты). Верхняя кривая получена с образца $Si_{0.7}Ge_{0.3}$ с пониженной неоднородностью в распределении германия из-за более низкой температуры выращивания ($500^{\circ}C$). На вставке приведен фрагмент рефлектометрической кривой образца со слоем 20 нм, на котором видно понижение интенсивности пиков (указано стрелкой) из-за наложения пиков от слоя SiGe на систему пиков от суммарной толщины эпитаксиальных слоев

границ [13, 14]. Для сравнения на этом же рисунке верхняя кривая была записана от слоя $Si_{0.7}Ge_{0.3}$ толщиной 80 нм, в котором неоднородное распределение германия практически отсутствует из-за низкой

температуры роста ($500^{\circ}C$). На рис. 2 хорошо видно, что наибольшая интенсивность максимумов наблюдается в образце $Si_{0.7}Ge_{0.3}$ и в слое с наибольшей толщиной 70 нм. Во всех исследованных образцах,

кроме образца с самым тонким слоем SiGe (6 нм), интенсивность максимумов существенно снижается с возрастанием угла. Сравнение угловых положений на экспериментальных кривых с расчетными кривыми позволяет сделать вывод о том, что система рефлектометрических пиков образуется от суммарной толщины покровного слоя кремния и слоя SiGe, тогда как пики от покровного слоя кремния подавлены либо из-за шероховатой границы раздела между SiGe и покровным слоем Si, либо из-за размытого по концентрации германия перехода между этими слоями.

В образцах с толстым покровным слоем кремния (100 нм) можно определить толщину тонкого слоя SiGe с точностью до нескольких десятых нанометра путем определения угловых положений пиков пониженной интенсивности. В тех угловых положениях, в которых соблюдается примерное равенство $mt_{\text{SiGe}} \approx nt_{\text{Si+SiGe}}$, где m, n — целые числа, а t_{SiGe} и $t_{\text{Si+SiGe}}$ соответствуют значениям толщины слоя SiGe и суммарной толщине двух слоев, наблюдаются пониженные интенсивности рефлектометрических максимумов. Одно из таких угловых положений указано стрелкой на вставке к рис. 2. Отметим, что пониженная интенсивность наблюдается не на одном, а на двух–трех близлежащих пиках, что свидетельствует о размытости границы раздела между SiGe и покровным слоем Si. Сравнение измеренных значений ширины квантовой ямы с технологическими значениями толщины слоев для образцов № 827, № 837 показало, что реальные величины толщины слоев на 1–2 нм меньше технологических, приведенных в табл. 1. По-видимому, это связано с тем, что при общей невысокой концентрации германия первые нарастающие слои состоят практически из чистого кремния. Из рис. 2 также следует, что интенсивности рефлектометрических максимумов в образце с самым тонким слоем SiGe выше и меньше деградируют с ростом угла, чем в образцах с более толстыми слоями. Это является дополнительным указанием на возрастание неоднородности в распределении германия с увеличением толщины слоя SiGe.

На рис. 3 приведены двумерные картины сечения обратного пространства вблизи рефлекса (004) для образца № 985 со слоем SiGe толщиной 70 нм. Они были получены путем последовательной записи кривых при непрерывном сканировании ($2\theta - \omega$) в заданном интервале углов с шагом 0.001° по шкале 2θ и фиксированным сдвигом на 0.0005° по шкале ω для каждой следующей кривой. Двумерные картины получают с использованием третьего кристалла-анализатора, пропускающего в детектор лу-

чи, падающие на анализатор под углом Брэгга с отклонением $\pm 6''$ после отражения рентгеновского пучка на трех последовательных симметричных рефлексах Ge(220) анализатора. Это позволяет получать дополнительную информацию о разориентации между кристаллическими плоскостями подложки и слоев, а также выявлять присутствие диффузного рассеяния от несовершенных участков эпитаксиальных слоев.

На двумерных картинах, полученных с использованием кристалла-анализатора, положение пика по горизонтальной оси соответствует величине межплоскостного расстояния отражающих областей. Перед началом съемки образец ориентируется таким образом, чтобы нулевое значение по шкале ω совпадало с максимумом кривой качания пика подложки, который расположен в правой части каждой из картин на рис. 3 в области большого скопления изоинтенсивных контуров. При совместном сканировании детектора с удвоенной скоростью и образца ($2\theta - \omega$ -сканирование) положение пиков по шкале ω от слоя SiGe и покровного слоя Si будет совпадать с нулевым значением, если кристаллические плоскости (001) этих слоев параллельны аналогичным плоскостям подложки. Фрагменты слоев, разориентированные на угол $\pm \Delta\omega$, попадают в отражающее положение после поворота образца на этот угол и поэтому их изображения сдвинуты по вертикальной шкале ω в зависимости от величины и знака этой разориентации.

Дифракционный пик от слоя SiGe вытянут по горизонтали из-за малой толщины, но по шкале ω его центр примерно совпадает с центром пика подложки на каждом рисунке, что означает практически полное отсутствие дислокаций несоответствия на границе раздела Si–SiGe. Главное различие между этими дифракционными картинками заключается в присутствии диффузного рассеяния по шкале ω по обе стороны от пика подложки на рис. 3а, которое усиливается при приближении детектора к образцу (рис. 3б) и практически исчезает при повороте образца на 90° вокруг нормали к ростовой поверхности (рис. 3в). Среднее значение параметра решетки от тех областей пленки, от которых наблюдается диффузное рассеяние, совпадает с параметром решетки кремния, следовательно, можно заключить, что оно возникает от кристаллических плоскостей покровного слоя кремния, эпитаксиально нарастающего на слой SiGe. Поскольку на этих картинах диффузное рассеяние вблизи пиков слоев SiGe отсутствует, то можно предположить, что структурные искажения накапливаются в тонкой верхней части слоя SiGe. Если

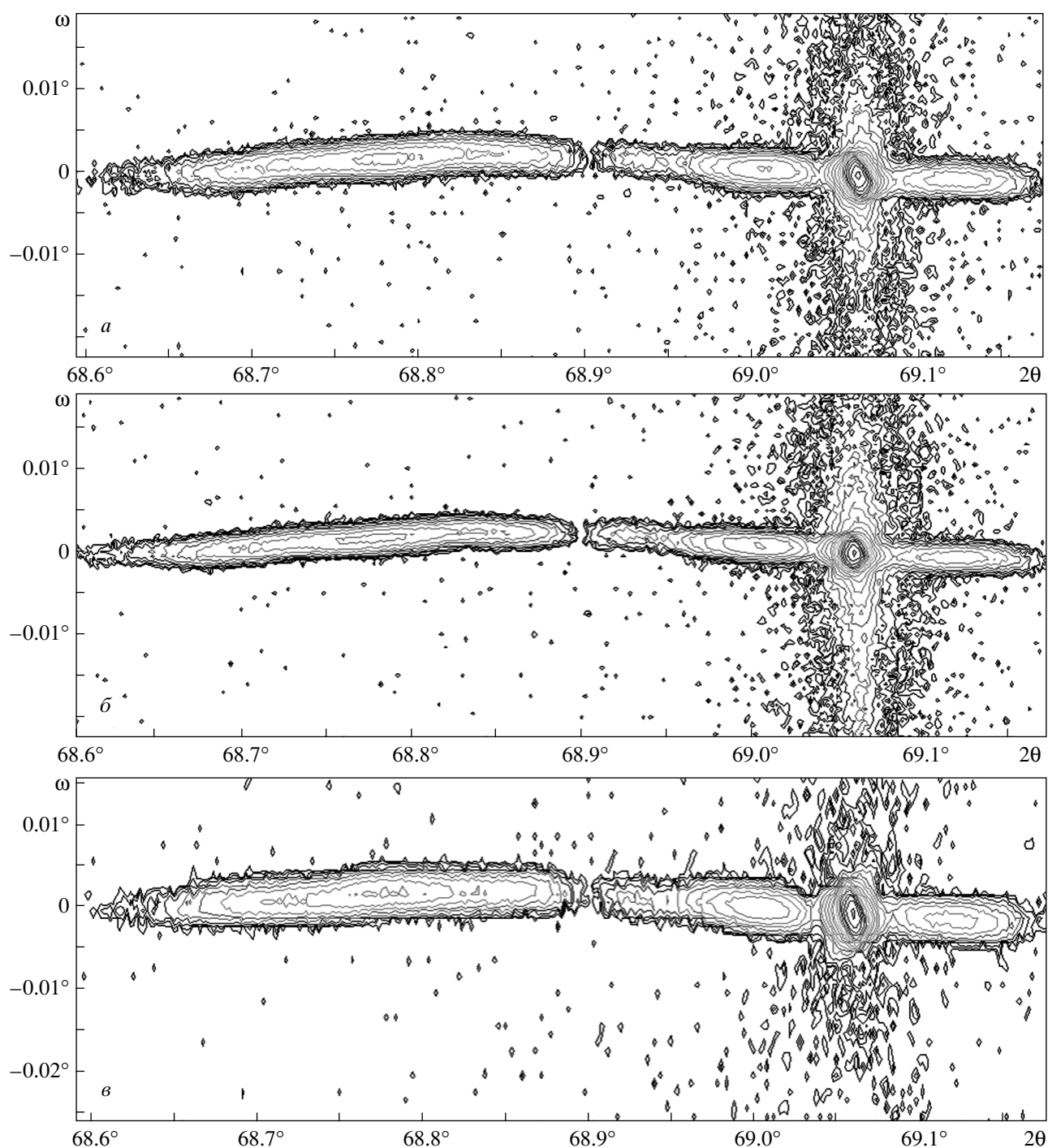


Рис. 3. Двумерная картина дифракции $[(2\theta - \omega), \omega]$ вблизи рефлекса (004) образца № 985 со слоем SiGe толщиной 70 нм. При приближении кристалла-анализатора к образцу наблюдается возрастание диффузного рассеяния от покровного слоя Si (рис. 3б). Практически полное исчезновение диффузного рассеяния наблюдается после поворота образца на 90° вокруг нормали к ростовой поверхности (рис. 3в). Положение пика подложки соответствует максимальной концентрации изолиний интенсивности

из-за сегрегации поверхностные слои SiGe аккумулируют избыточный германий, выталкиваемый более ранними слоями роста, и этот германий неоднородно распределен по ростовой поверхности, тогда дифракционная картина от слоя SiGe должна состоять из двух частей. Самая верхняя и менее совершенная часть слоя будет отражать рентгеновские лучи в существенно более широком диапазоне углов дифракции, как из-за малой толщины неоднородного слоя, так и из-за его меньшего структурного совершенства. Поскольку стандартное расстояние образец – счетчик импульсов в дифрактометре PANalytical X'PERT PRO MRD равно 320 мм, значительная часть интенсивности от несовершенной части пленки может не доходить до счетчика импульсов.

На рис. 4а–в приведены картины двумерного сканирования на рефлексе (113) образца № 985 слоя SiGe толщиной 70 нм, полученные при разных расстояниях от счетчика импульсов до образца. Угол дифракции на рефлексе (113) является наименьшим среди всех возможных углов в геометрии на отражение при использовании подложки Si(001), поэтому возможность наблюдения на нем дифракции от несовершенных областей квантовой ямы максимальна. В приближенном положении счетчика импульсов при записи асимметричных рефлексов нет возможности использовать третий кристалл-анализатор, поэтому двумерные области были получены с использованием узкой щели $1/32^\circ$ (0.175 мм) в качестве анализатора угловых положений отраженных лучей. Для повышения разрешения узкая щель сочеталась с фокусирующей геометрией съемки асимметричных рефлексов. Дифракция в геометрии $(\theta + \varphi)$ (рис. 5а) позволяет уменьшить ширину отраженного луча по сравнению с шириной падающего луча в n раз, где n равно отношению синусов углов, образованных падающим и отраженным лучами с поверхностью образца [9]. Наклон плоскости (113) к ростовой поверхности ($\varphi = 25.24^\circ$) лишь немного меньше величины брэгговского угла этого рефлекса (для кремния $\theta = 28.06^\circ$), что позволяет существенно сузить отраженный пучок.

На двумерных картинах асимметричных рефлексов центры пиков подложки и слоя SiGe уже не могут иметь одно и то же значение угла ω , поскольку одноименные плоскости (113) пленки и подложки разориентированы на угол $\Delta\varphi$ из-за тетрагональной деформации решетки слоя (рис. 5а). Поэтому на двумерной картине $[2\theta, \omega]$ пики подложки и упруго напряженного слоя SiGe лежат на прямой линии, повернутой против часовой стрелки от горизонтали на

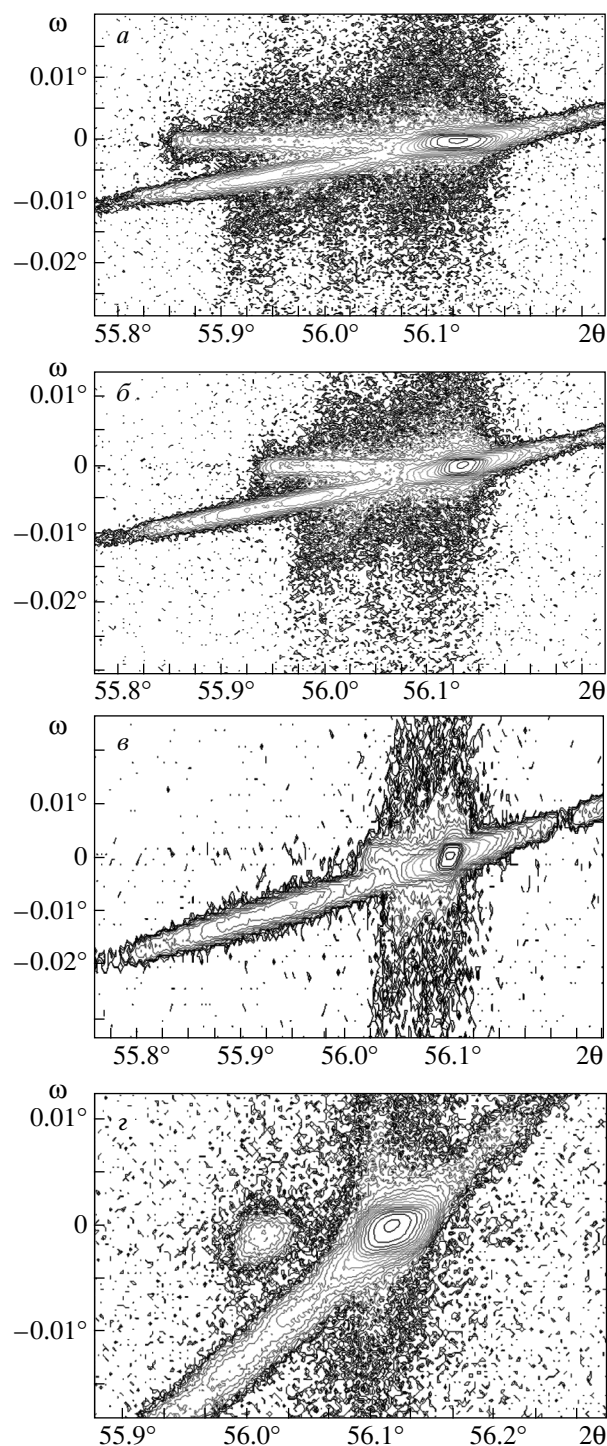


Рис. 4. Картина двумерного сканирования $[2\theta, \omega]$ вблизи рефлекса (113) от слоя SiGe толщиной 70 нм, полученная при расстояниях от образца до счетчика импульсов равных 120 мм (а), 170 мм (б), 320 мм (в). С увеличением расстояния наблюдается уменьшение диффузного рассеяния. Для слоя толщиной 33 нм (г) наблюдаются уменьшение интенсивности и изменение формы диффузного рассеяния

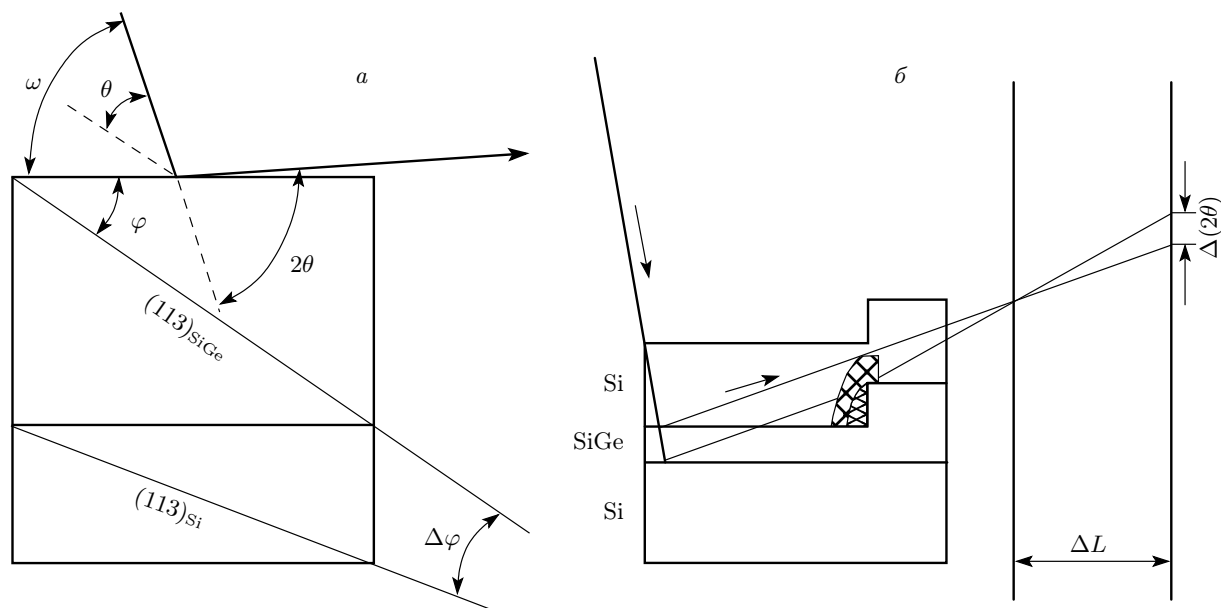


Рис. 5. а) Схема дифракции от асимметричной плоскости (113), в которой угол падения рентгеновских лучей на поверхность образца (ω) больше брэгговского угла (θ) на угол асимметрии (φ). Из-за тетрагональной деформации решетки слоя SiGe между одноименными плоскостями слоя и подложки возникает дополнительная разориентация на угол $\Delta\varphi$. б) Сдвиг в сторону больших значений углов по шкале 2θ той диффузной части рефлекса (113), которая претерпела дополнительное отражение на искривленной поверхности с повышенной концентрацией германия на уступах макроступеней роста. Среднее значение угла отклонения вычисляется по величине смещения $\Delta(2\theta)$ при известном расстоянии ΔL между двумя положениями счетчика импульсов

угол $\Delta\theta - \Delta\varphi$, где $\Delta\theta$ равно разности в угловых положениях пиков слоя и подложки из-за разницы в межплоскостных расстояниях. Помимо этих пиков при близком расположении к образцу счетчика импульсов на рис. 4а, б хорошо видны области диффузного рассеяния как в виде непрерывного фона вокруг пика, соответствующего квантовой яме, так и в виде сплошного горизонтального пика. Необычность поведения этих областей диффузного рассеяния связана со сдвигом их центра в сторону больших углов по шкале 2θ при удалении счетчика импульсов, в результате чего диффузный пик практически полностью исчезает при стандартном расстоянии между счетчиком импульсов и образцом равном 320 мм (рис. 4в). Напомним, что шкала углов 2θ является абсолютной шкалой в том смысле, что положение максимума рефлекса на ней связано только с величиной угла дифракции, тогда как положение пика по шкале ω зависит как от величины угла дифракции, так и от ориентации отражающей плоскости относительно падающего пучка. Сдвиг максимума диффузного рефлекса по шкале 2θ можно объяснить дополнительным отражением дифрагированного луча на холмиках роста или искривленных кристаллических

плоскостях из-за неоднородного распределения германия по ростовой поверхности (рис. 5б). Величина сдвига при переносе счетчика с расстояния равного 120 мм на 170 мм составляет 0.074° , считая положение центра пика подложки одним и тем же. Это соответствует значению 0.220 мм на окружности радиусом 170 мм. Таким образом, отклонение луча, претерпевшего дополнительное отражение, составляет 0.25° . Угол наклона обнаруженных неровностей мал (менее 1°), и они находятся на границе раздела между слоем SiGe и покровным слоем Si, что делает затруднительным их наблюдение с помощью атомно-силовой микроскопии. Чуть более слабое диффузное отражение наблюдается также и на рефлексе (224). Но на двумерных картинах трех других рефлексов (113), полученных после поворота образца вокруг нормали к ростовой поверхности на углы 90° , 180° и 270° , диффузное рассеяние не наблюдается.

Нами была предпринята попытка связать появление такого асимметричного диффузного рассеяния с небольшой разориентацией ростовой поверхности от точной кристаллографической плоскости (001). В четырех из пяти исследованных образцов разориен-

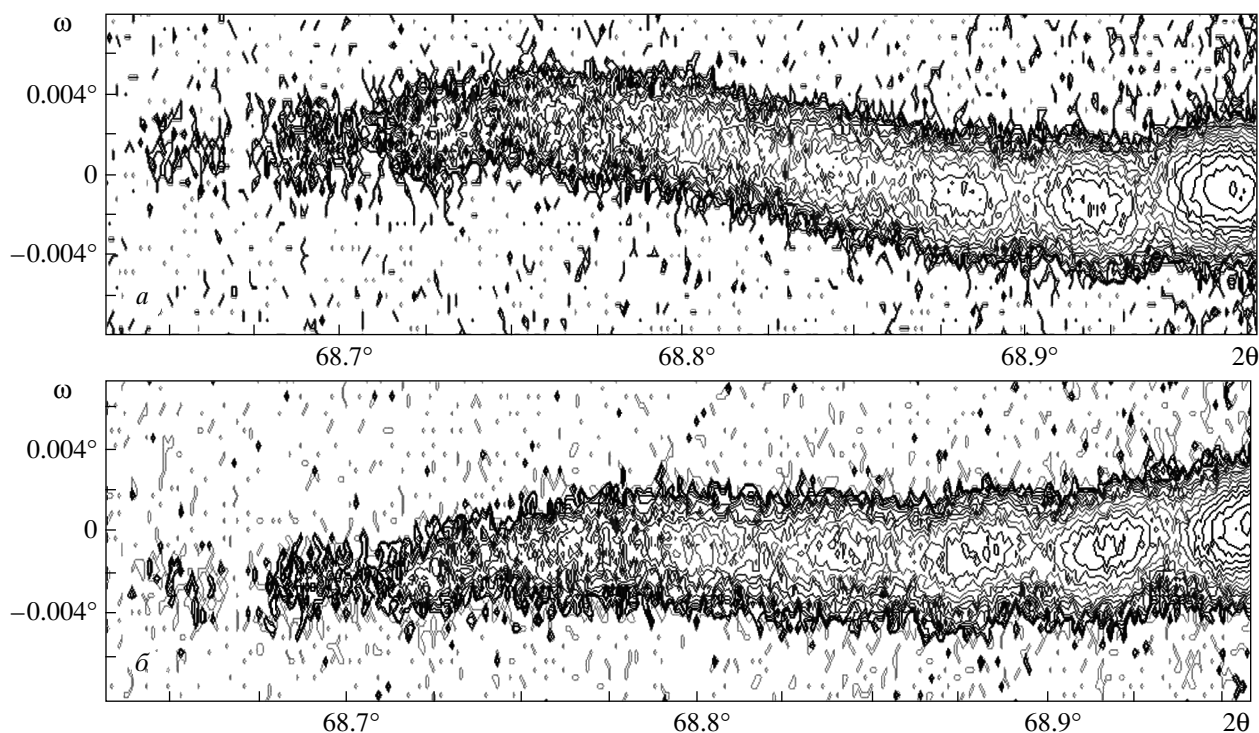


Рис. 6. Различные искривления дальней части дифракционного пика на двумерной картине дифракции $[(2\theta - \omega), \omega]$ вблизи рефлекса (004) слоя толщиной 33 нм образца № 826 до (а) и после (б) поворота образца на 90° вокруг нормали к плоскости образца

тация ростовой поверхности не превышала 0.1° и никак не была связана с направлением [011], вдоль которого лежали асимметричные рефлексы с диффузным рассеянием. Более того, в образце № 985 слоя SiGe толщиной 70 нм слабое диффузное рассеяние наблюдалось также и на одном из двух возможных рефлексов (044), проекции которых на плоскость роста составляли 45° с направлением [011]. А в других образцах диффузное рассеяние не наблюдалось ни на одном рефлексе (044).

На двумерных картинах квантовых ям шириной 54, 33 и 20 нм также наблюдается анизотропное диффузное рассеяние вблизи асимметричных рефлексов (113) и (224). Но с уменьшением толщины слоя SiGe диффузное рассеяние становится намного меньше (рис. 4з) и смещение пика при переходе от расстояния до счетчика равного 120 мм к расстоянию равному 170 мм также в несколько раз уменьшается по сравнению с образцом с более широкой ямой, величиной 70 нм. Таким образом, искривление кристаллических плоскостей уменьшается с уменьшением толщины слоя SiGe.

Совокупность экспериментальных данных позволяет сделать вывод о том, что обнаруженные неоднородности имеют вид асимметричной волнистой поверхности типа песчаной дюны, направление гребней которой близко к направлению [011], но не всегда точно с ним совпадает.

Неоднородное распределение германия по толщине пленки, так же как и по его поверхности, хорошо видно на рис. 6, на котором приведены фрагменты двумерных дифракционных картин на рефлексе (004) образца № 826 слоя SiGe толщиной 33 нм. Пик подложки, который должен находиться в правой части двумерной картины, исключен путем ограничения области сканирования по шкале 2θ , для того чтобы не затемнять тонкие детали дифракционных пиков квантовых ям. На верхнем рисунке часть пика изогнута, что связано с разориентацией ее кристаллических плоскостей примерно на 0.003° относительно центра пика подложки. Эта изогнутая часть пика максимально удалена по горизонтальной шкале от пика подложки, из чего можно сделать вывод о присутствии локальных искривлений кристаллических

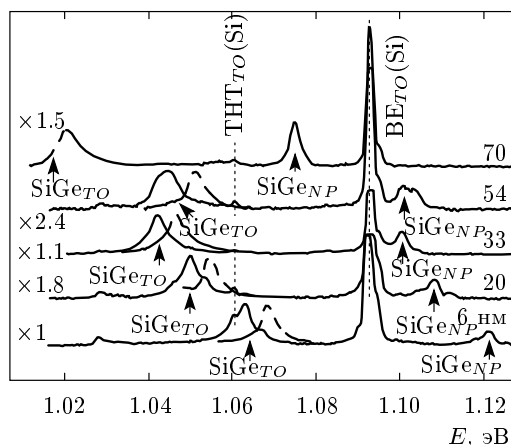


Рис. 7. Спектры фотолюминесценции всех исследуемых структур в краевой области, записанные при $T = 5$ К (сплошная линия), и фрагменты спектров фотолюминесценции, демонстрирующие излучение свободных экситонов в слое SiGe при $T = 15$ К (пунктир). Плотности мощности возбуждения 15 мВт/см^2 . Для нормировки каждый из спектров умножен на коэффициент

плоскостей в участках пленки с повышенной концентрацией германия. В спектрах люминесценции именно этого образца наблюдается наиболее яркое дислокационное излучение (см. ниже рис. 8). Но поскольку центр основной части пика по шкале ω совпадает с центром пика подложки, можно также сделать вывод, что дислокации локализованы не на границе раздела Si/SiGe, а в объеме самого слоя SiGe. Картина на рис. 6б получена с того же самого образца на том же самом рефлексе (004), но после его поворота вокруг нормали к ростовой поверхности на 90° . Она иллюстрирует анизотропию в распределении германия вдоль направлений $[110]$ и $[\bar{1}\bar{1}0]$ в областях с его повышенной концентрацией.

3.2. Люминесценция

На рис. 7 приведены спектры низкотемпературной фотолюминесценции исследуемых структур при $T = 5$ К и малых плотностях возбуждения ($W = 15 \text{ мВт/см}^2$). В условиях эксперимента все исследуемые образцы обладали сравнительно высоким квантовым выходом и узкими линиями излучения как слоя SiGe, так и объемного кремния (буферного и покровного слоев, подложки). Тем не менее с увеличением ширины ямы наблюдалась тенденция незначительного снижения квантового выхода фотолюминесценции из слоя твердого раствора. В длинноволновой области присутствовало дислока-

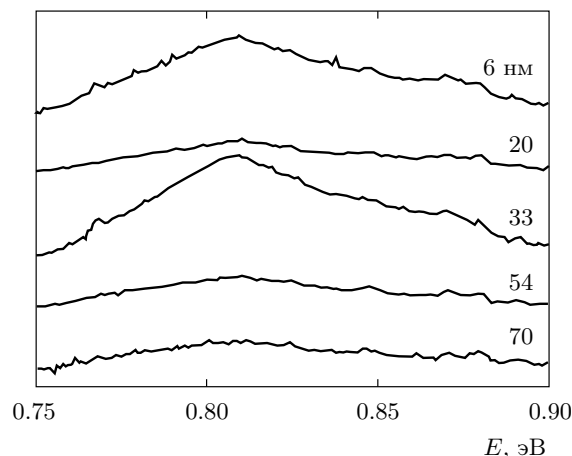


Рис. 8. Спектры фотолюминесценции всех исследованных структур в области дислокационного излучения

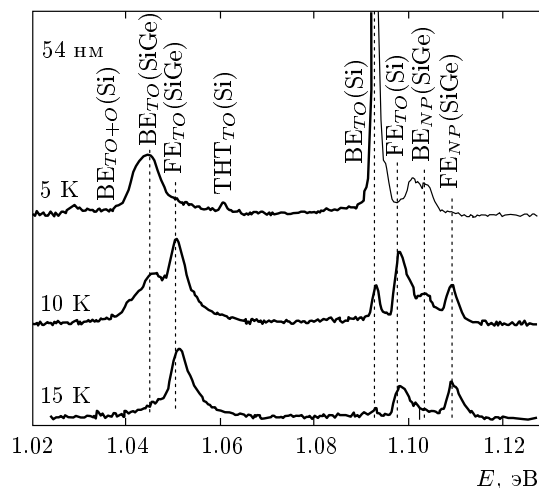


Рис. 9. Температурная зависимость спектров фотолюминесценции структуры № 832 со слоем SiGe толщиной 54 нм; плотность мощности возбуждения 15 мВт/см^2

ционное излучение (рис. 8), но для всех образцов его интенсивность была на 1.5–2 порядка меньше интенсивности краевого излучения.

На рис. 9 приведена зависимость спектра низкотемпературной фотолюминесценции от температуры для структуры с ямой шириной 54 нм. На нем видно, что при $T = 5$ К в спектре доминирует излучение экситонно-примесных комплексов (ВЕ) в объемном кремнии, включающее оптические переходы с участием ТО-, ЛО- и ТА-фононов, а также линии излучения, соответствующие двухдырочному переходу (THT_{TO} — two hole transition — оптический пе-

реход, при котором после рекомбинации экситона, локализованного на нейтральном акцепторе, дырка, связанная на этом акцепторе, переходит в возбужденное состояние) и комбинированным фононным повторениям [15]. Спектральное положение линии $\text{ТНТ}_{\text{ТО}}$ позволяет заключить, что основной фоновой примесью в структуре является бор. При увеличении температуры происходит диссоциация связанных на боре экситонов, выражающаяся в гашении линий $\text{ВЕ}(\text{Si})$, $\text{ТНТ}_{\text{ТО}}$ и увеличении интенсивности излучения свободных экситонов $\text{FЕ}_{\text{ТО}}(\text{Si})$.

Похожая трансформация спектра фотолюминесценции имеет место и для слоя SiGe . При $T = 5 \text{ K}$ в излучении доминируют линии локализованного экситона — бесфононный переход $\text{ВЕ}_{\text{NP}}(\text{SiGe})$ и его фононное повторение $\text{ВЕ}_{\text{ТО}}(\text{SiGe})$, сдвинутое в длинноволновую область на энергию поперечного оптического фонона в кремнии (57.8 мэВ). С ростом температуры наблюдается гашение этих линий, сопровождающееся появлением в спектрах излучения делокализованных экситонов ($\text{FЕ}_{\text{NP}}(\text{SiGe})$ и $\text{FЕ}_{\text{ТО}}(\text{SiGe})$). При $T = 15 \text{ K}$ для всех образцов излучение из слоя SiGe представлено только линиями делокализованного экситона. Измерения кинетики фотолюминесценции в исследуемых структурах дают времена жизни около 1 мкс (при $T = 15 \text{ K}$) для делокализованного экситона и около 350 нс (при $T = 5 \text{ K}$) для локализованного. Последняя величина типична для экситонов, связанных на примесях в твердых растворах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, и слишком мала по сравнению с временами жизни экситонов, локализованных на флуктуациях потенциала.

Переход от излучения локализованных экситонов к излучению делокализованных экситонов с ростом температуры, аналогичный приведенному на рис. 8, наблюдался для всех исследуемых структур. Фрагменты спектров низкотемпературной фотолюминесценции при $T = 15 \text{ K}$ в области ТО-фононного повторения слоя SiGe , демонстрирующие излучение делокализованных экситонов, приведены на рис. 7 в виде пунктирных линий. Совокупность спектров, приведенных на рис. 7, позволяет определить положение дна экситонной зоны, оценить роль неоднородных эффектов, а также определить энергию связи экситона на примеси во всех исследуемых структурах. Все эти величины для различных образцов систематизированы в табл. 2. Отдельно в табл. 2 приведена концентрация германия, рассчитанная по спектральному положению линий излучения свободного экситона. Конкретные детали используемого расчета изложены в Приложении. Необходимо отметить, что при наличии крупномасштабных неод-

родностей в распределении германия используемый расчет дает оценку концентрации (снизу) для областей слоя SiGe с наибольшей концентрацией легирующего компонента, так как в таких областях максимален локализирующий потенциал для экситонов. Погрешность при расчете концентрации германия определяется, в основном, неоднородными эффектами (в случае узкой квантовой ямы дополнительная сложность связана с изменением энергии связи экситона). Для количественной характеристики неоднородных эффектов в табл. 2 приведен средний «разброс» σ энергии дна экситонной зоны, определенный по форме линий $\text{ВЕ}(\text{SiGe})$ и $\text{FЕ}(\text{SiGe})$ на основе результатов работы [16].

Рассеивающий короткодействующий потенциал, возникающий в результате различия локального атомного потенциала и усредненного потенциала твердого раствора, снимает ограничение, налагаемое законом сохранения квазимпульса, и приводит к появлению интенсивных бесфононных полос в люминесценции. Известно [17], что для объемных твердых растворов SiGe и псевдоморфных пленок SiGe/Si соотношение интенсивностей бесфононного перехода и его фононного повторения пропорционально вероятности образования Si-Ge -пары $Ax(1-x)$, где x — концентрация германия, $1-x$ — концентрация кремния, A — не зависящая от состава константа. На основе данного факта нами была сделана независимая оценка концентрации германия в исследуемых квантовых ямах. Для определения масштабирующего множителя $A \approx 7.6$ использовались данные работы [17] (отметим, что приведенный расчет масштабирующего множителя носит оценочный характер, так как для тонких слоев SiGe эта величина зависит от вида волновой функции состояния, участвующего в рекомбинации, и, следовательно, ширины слоя). Результаты такой оценки также приведены в табл. 2, они качественно подтверждают результаты более точного расчета.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Структурные исследования слоев $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x < 0.1$) толщиной 6–70 нм, выращенных на подложках $\text{Si}(001)$, выявили две отличительные особенности их строения: пониженная концентрация германия в слоях толщиной 6–30 нм с постепенным ее нарастанием и развитием неоднородностей на поверхности роста по мере увеличения толщины слоев. При росте пленок $\text{Si}_{79}\text{Ge}_{21}$ также отмечалась пониженная концентрация германия с градиентом

Таблица 2. Положение дна экситонной зоны, энергия связи экситона на примеси и расчетное содержание германия в различных квантовых ямах

№	$E_{NP}(QW)$, эВ	σ , мэВ	Энергия связи BE , мэВ	Ge, % (расчет по положению дна эксит. зоны)	QW_{NP}/QW_{TO}	Ge, % (расчет по соотн. QW_{NP}/QW_{TO})
827	1.1264	> 1	3.7	4.4 (0.5)	0.249	3.4
837	1.1127	1.7	3.4	5.2 (0.3)	0.333	4.6
826	1.1049	1.8	3.3	6.0 (0.3)	0.255	3.5
832	1.1095	2.2	5.1	5.5 (0.3)	0.274	3.8
985	1.0788	1.8	3.5	9.0 (0.3)	0.694	10.1

состава в первых двух нанометрах [3]. Для структур, исследуемых в настоящей работе, более низкие концентрации германия (в четыре раза) и температуры выращивания (на 100°C) по сравнению с работой [3] приводят к расширению начальной области пленки, в которой наблюдается пониженная концентрация германия. Обычно это явление связывают с сегрегацией германия на ростовой поверхности [3]. Но в работе [18] была обнаружена пониженная концентрация кадмия в квантовых ямах $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$, увеличивающая величину несоответствия в параметрах решеток квантовой ямы и подложки GaAs, и, наоборот, повышенная концентрация цинка в квантовых ямах $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$, уменьшающая величину этого несоответствия. Очевидно, что в квантовых ямах напряжения несоответствия оказывают существенное влияние на распределение легирующего компонента, затрудняя входение того компонента, который увеличивает величину несоответствия в параметрах решетки пленки относительно подложки.

Анализ табл. 1 и 2 показывает, что во всех пленках концентрация x , определенная с помощью рентгеноструктурного анализа, меньше концентрации, вычисленной на основе спектров низкотемпературной фотолуминесценции. Так как рентгеноструктурный анализ дает, по сути, среднюю концентрацию германия в пленке, а анализ спектров позволяет оценить концентрацию в областях слоя SiGe с его наибольшей концентрацией, можно заключить, что в каждой квантовой яме существует область с повышенной концентрацией германия. Эти области характеризуются наличием в них делокализованных экситонных состояний, и, следовательно, имеют макроскопические размеры.

Как известно, напряжения сжатия в эпитаксиальных слоях SiGe на Si(001) стимулируют объединение нескольких монокристаллических ступеней роста в макроступени высотой в несколько десятков слоев каждая, разделенных плоскими террасами с типичным расстоянием между ними порядка 1 мкм [19]. По-видимому, и в слоях с низким ($x < 10\%$) содержанием германия имеют место подобные эффекты, связанные с более ранним началом релаксации упругих напряжений за счет развития шероховатости поверхности, чем за счет образования дислокаций. В исследуемом случае движущей силой для развития шероховатости поверхности является приповерхностный слой SiGe, обогащенный Ge из-за его сегрегации. Повышенное входение германия вблизи уступов (ступеней) должно приводить к локальной деформации одной системы асимметричных кристаллических плоскостей нарастающего покровного слоя кремния. Локальное возрастание периода решетки квантовой ямы в направлении [113] в областях с повышенной концентрацией германия должно компенсироваться локальным сжатием периода идентичности покровного слоя кремния в том же направлении [113] при отсутствии дислокаций несоответствия (рис. 5б).

Наблюдение диффузного рассеяния от покровного слоя кремния толщиной 100 нм в образцах с наиболее широкими ямами SiGe в стандартной геометрии дифрактометра PANalytical X'PERT PRO MRD Extended при отсутствии такового от самих ям SiGe позволяет рассматривать этот покровный слой в виде своеобразного усилителя сегрегации германия в верхних фрагментах пленки SiGe. Повышенная концентрация германия вблизи уступов макроступеней SiGe, образующихся как способ частичной релакса-

ции напряжений несоответствия, должна приводить к небольшим искривлениям кристаллических плоскостей покровного слоя кремния в результате упругой релаксации напряжений несоответствия в направлениях, отклоненных от кристаллографической плоскости (001). Важно подчеркнуть, что при упругой релаксации напряжений несоответствия покровным слоем его кристаллические плоскости отклонены в обе стороны по шкале ω от среднего положения пика подложки. В пленках $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$ нами наблюдались также случаи заметной пластической релаксации напряжений несоответствия в покровном слое кремния, кристаллические плоскости которого разориентированы только в одном направлении, совпадающем с направлением разориентации подложки от точной плоскости (001).

Диффузное рассеяние разной интенсивности от покровного слоя кремния наблюдалось нами во всех исследованных образцах, что может быть связано с нестабильностью плоского фронта кристаллизации даже в тонких слоях SiGe. Но слабое диффузное рассеяние от самого слоя SiGe появляется только в слоях толщиной 20 нм и более. Его появление коррелирует с понижением квантового выхода люминесценции в несколько раз при переходе от ямы шириной 6 нм к более толстым слоям.

5. ВЫВОДЫ

Применение высокоразрешающих методик рентгеновского дифракционного анализа и низкотемпературной фотолюминесценции для исследования квантовых ям SiGe шириной 6–70 нм с малой концентрацией германия позволило выявить неоднородное распределение германия как по толщине, так и по ростовой поверхности. Таким образом, при концентрациях германия $x < 0.1$ наблюдается примерно такое же поведение системы SiGe, как и при больших его концентрациях, связанное с более ранним стартом механизма релаксации упругих напряжений за счет развития шероховатости по сравнению с дислокационным механизмом. При этом наблюдаются волнообразные искажения кристаллических плоскостей, ориентация которых может определяться не только разориентацией подложки от кристаллографической плоскости (001), но и другими факторами. Мы полагаем, что обнаруженные латеральные неоднородности связаны с накоплением германия на ступенях роста, которые объединяются в макроступени для достаточно толстых пленок SiGe. Изменение

угла разориентации подложки может быть использовано для управления образованием макроступеней.

Скопление германия вблизи уступов макроступеней может являться одной из причин изменения свойств электронно-дырочной плазмы и электронно-дырочной жидкости в толстых пленках SiGe/Si. Описанная структура пленок неизбежно приводит к образованию потенциальных ям для электронов и дырок, представляющих собой эффективные центры конденсации и существенно снижающих порог образования электронно-дырочной жидкости.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-02-01233-а), а также в рамках аналитической ведомственной целевой программы «Субволновая оптика и спектроскопия композитных наноструктур» (проект № 2.1.1/4294).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Оценка состава квантовых ям на основе анализа спектров низкотемпературной фотолюминесценции

Зонная диаграмма недеформированных твердых растворов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ для $x \leq 0.85$ схожа с зонной диаграммой объемного кремния. Как известно, в этом случае шестикратно вырожденный минимум зоны проводимости (Δ_6) находится в точках $(2\pi/a)(0.85, 0, 0)$, а четырехкратно вырожденный максимум валентной зоны, формирующий состояния легких (lh) и тяжелых (hh) дырок, находится в центре зоны Бриллюэна. Вырождение частично снимается двусосным сжатием, возникающим в пленке $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ вследствие различия постоянных решетки у кремния и твердого раствора $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. В случае псевдоморфного роста пленки на ориентированной подложке Si(001) возникающее двусосное сжатие понижает энергию четырех долин (Δ_4), отвечающих состояниям с волновым вектором, лежащим в плоскости пленки, и повышает энергию двух оставшихся долин (Δ_2). Кроме того, такое сжатие понижает энергию легких дырок и увеличивает энергию тяжелых, снимая, таким образом, вырождение в Γ -точке.

При гелиевых температурах ширина запрещенной зоны пленки в зависимости от ее состава с учетом напряжений описывается следующей интерполяционной формулой [17]:

$$E_g(x, 4.2 \text{ K}) = 1.17 - 0.896x + 0.396x^2 \text{ [эВ]}. \quad (1)$$

Данное выражение получено на основе анализа спектров низкотемпературной фотолюминесценции и для $x \leq 0.1$ имеет погрешность около 5 мэВ, связанную, в основном, с неоднородными эффектами. Выражение (1) хорошо согласуется с имеющимися теоретическими расчетами, погрешность которых, как правило, заметно выше [20] (10–20 мэВ).

До настоящего времени остается не ясным, какой тип зонной диаграммы реализуется для квантовых ям $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ с низким содержанием германия, $x \leq 0.1$. По-видимому, для структур с низким содержанием германия эффективный потенциал, связанный с разрывом зон проводимости, мал по сравнению с кулоновским взаимодействием, являющимся основным механизмом локализации электронов в слое твердого раствора.

Таким образом, расчет концентрации германия в слоях SiGe с его низким содержанием по спектрам фотолюминесценции может быть сделан на основе численного решения уравнения

$$E_g(x, 4.2 \text{ K}) + \Delta E_{hh}(x, d) - E_{ex}(x, d) = \hbar w_{ex}, \quad (2)$$

где $E_g(x, 4.2 \text{ K})$ — ширина запрещенной зоны в пленке, без учета квантоворазмерных эффектов, определяемая формулой (1), d — толщина слоя SiGe , $\Delta E_{hh}(x, d)$ — сдвиг нижней подзоны тяжелых дырок за счет размерного квантования, $E_{ex}(x, d)$ — энергия связи экситона в зависимости от концентрации x и ширины слоя d , включающая эффекты, связанные с разрывом зон проводимости $\Delta_6 - \Delta_4$. В рамках данной работы величина $E_{ex}(x, d)$ оценивалась на основе результатов [17] и оказалась близкой к энергии связи свободного экситона в объемном кремнии (около 14.5 мэВ) для всех исследуемых структур, $\hbar w_{ex}$ — положение дна экситонной зоны, которое определялось по спектрам фотолюминесценции. Поправка $\Delta E_{hh}(x, d)$ учитывалась для слоев SiGe толщиной 5, 15 и 25 нм и рассчитывалась в приближении эффективных масс. В основе расчета лежала модель прямоугольной потенциальной ямы глубиной $U = E_g(0, 4.2 \text{ K}) - E_g(x, 4.2 \text{ K})$ с эффективными массами тяжелых дырок $m_0 = m_{\text{Si}}(\hbar\hbar) = 0.537m_e$ вне ямы и $m_1(x)$ внутри ямы. Масса $m_1(x)$ вычислялась на основе интерполяционных формул [21]. Для сшивки огибающих волновой функции на границах квантовых ям использовались граничные условия Бастарда [22]. В рамках такой модели

$$\Delta E_{hh}(x, d) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1(x)},$$

где k — наименьший положительный корень уравнения

$$\left(1 + \frac{2m_1^2(x)U}{m_0\hbar^2k^2} - \frac{m_1(x)}{m_0}\right)^{-1/2} = \cos \frac{kd}{2}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Stangl, V. Holy, and G. Bauer, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 725 (2004).
2. J. Tersoff and F. K. LeGoues, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3570 (1994).
3. J. A. Floro, E. Chason, S. R. Lee, R. D. Twisten, R. Q. Hwang, and L. B. Freund, *J. Electron. Mat.* **26**, 969 (1997).
4. P. Sutter and M. G. Lagally, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4637 (2000).
5. R. M. Tromp, F. M. Ross, and M. C. Teuter, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4641 (2000).
6. J. Tersoff, B. J. Spencer, A. Rastelli, and H. von Kanel, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 196104 (2002).
7. Т. М. Бурбаев, Е. А. Бобрик, В. А. Курбатов, М. М. Рзаев, Н. Н. Сибельдин, В. А. Цветков, Ф. Шэффлер, *Письма в ЖЭТФ* **85**, 410 (2007).
8. C. Lang, S. Kodambaka, F. M. Ross, and D. J. H. Cockayne, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 226104 (2006).
9. Р. Д. Джеймс, *Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей*, Изд-во иностр. лит., Москва (1950).
10. J. Hornstra and W. J. Bartels, *J. Cryst. Growth* **44**, 513 (1978).
11. P. F. Fewster, *X-Ray Scattering from Semiconductors*, Imperial College Press, London (2003).
12. J.-M. Baribeau, X. Wu, N. L. Rowell, and D. J. Lockwood, *J. Phys. Cond. Mat.* **18**, R139 (2006).
13. D. E. Savage, J. Kleiner, N. Schimke et al., *J. Appl. Phys.* **69**, 1411 (1991).
14. E. E. Fullerton, J. Pearson, C. H. Sowers et al., *Phys. Rev. B* **48**, 17432 (1992).
15. P. J. Dean, J. R. Haynes, and W. F. Flood, *Phys. Rev.* **161**(3), 711 (1967).

16. J. Christen and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* **42**, 7213 (1990).
17. D. J. Robbins, L. T. Canham, S. J. Barnett, A. D. Pitt, and P. Calcott, *J. Appl. Phys.* **71**, 1407 (1992).
18. В. П. Мартовицкий, В. И. Козловский, П. И. Кузнецов, Д. А. Санников, *ЖЭТФ* **132**, 1379 (2007).
19. V. Holy, A. A. Darhuber, J. Stangl, G. Bauer, J. Nutzel, and G. Abstreiter, *Phys. Rev. B* **57**, 12435 (1998).
20. L. Yang, J. R. Watling, R. C. W. Wilkins et al., *Semicond. Sci. Technol.* **19**, 1174 (2004).
21. M. M. Rieger and P. Vogl, *Phys. Rev. B* **48**, 14277 (1993).
22. G. Bastard, *Phys. Rev.* **24**, 5693 (1981).