Письма в ЖЭТФ, том 97, вып. 3, с. 180 – 184 © 2013 г. 10 февраля

Внутризонные оптические переходы дырок в напряженных квантовых ямах SiGe

А. И. Якимов[1], *В. В. Кириенко, В. А. Тимофеев, А. И. Никифоров*

Институт физики полупроводников им. Ржанова СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 9 января 2013 г.

Изучены спектры оптического поглощения поляризованного инфракрасного излучения в структурах с квантовыми ямами SiGe p-типа. Исследовались три типа структур, различающихся величиной и знаком двуосных упругих деформаций. Обнаружено, что при растяжении квантовой ямы в плоскости гетероперехода происходит двукратное увеличение коэффициента поглощения света в области межподзонных переходов. Полученные результаты объяснены сменой очередности расположения зон тяжелых и легких дырок, вызванной деформацией растяжения, и формированием основного состояния носителей заряда в зоне легких дырок.

DOI: 10.7868/S0370274X13030090

Известно, что квантовые ямы (КЯ) с электронным типом проводимости и изотропным тензором эффективных масс слабо чувствительны к излучению, вектор поляризации которого лежит в плоскости КЯ [1, 2]. Это обстоятельство связано с ортогональностью огибающих волновых функций электрона в подзонах, возникших в результате размерного квантования. Запрет межподзонных переходов для нормально падающего излучения является фактором, ограничивающим применение КЯ n-типа при создании инфракрасных (ИК) фотодетекторов. Альтернативой могут служить КЯ p-типа. В отличие от зоны проводимости, валентные состояния в типичных полупроводниках строятся на основе p-образных атомных орбиталей, что приводит к сильному спин-орбитальному взаимодействию. Спин-орбитальное взаимодействие связывает орбитальный момент дырки $\mathbf{L}$ и ее спин $\mathbf{S}$ таким образом, что хорошим квантовым числом, характеризующим дырочные состояния, является величина полного углового момента $\mathbf{J} = \mathbf{L}+\mathbf{S}$. Поскольку для p-образных состояний $L = 1$, угловой момент J принимает значения 3/2 или 1/2, а его проекция на вертикальную ось симметрии z – значения $\pm 3/2$ и $\pm 1/2$. Значения $J_z = 3/2$ соответствуют состоянию тяжелой дырки (HH), а $J_z = \pm 1/2$ – легкой дырки (LH) или дырки в спин-отщепленной зоне (SO). В КЯ p-типа непараболичность закона дисперсии, анизотропия эффективных масс, взаимодействие и перемешивание дырочных зон являются причиной разрешенных внутризонных переходов уже при любой поляризации света [3–5]. Качественно понять правила отбора для таких переходов можно на основе следующих соображений. В дипольном приближении матричный элемент перехода представляется в виде [6, 7]

$$\langle u_f \psi_f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{P} | u_i \psi_i \rangle \approx \langle u_f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{P} | u_i \rangle \langle \psi_f | \psi_i \rangle + + \langle u_f | u_i \rangle \langle \psi_f | e_z P_z | \psi_i \rangle, \quad (1)$$

где u и ψ – блоховская и огибающая части волновой функции двумерных дырок, $\mathbf{e}$ – вектор поляризации излучения, $\mathbf{P}$ – оператор импульса. Поскольку блоховские волновые функции, соответствующие зонам HH, LH и SO, ортогональны, второй член в этом выражении отличен от нуля только для переходов внутри одной и той же зоны в поляризации $\mathbf{e}||z$ (межподзонные переходы). И наоборот, из-за ортогональности огибающих волновых функций дырок, принадлежащих одной зоне, первое слагаемое отвечает за межвалентные переходы с произвольной поляризацией.

В объемном материале зоны тяжелых и легких дырок вырождены в точке $\mathbf{k} = 0$. Однако в КЯ из-за размерного ограничения движения дырок в направлении роста структуры z происходит расщепление зон HH и LH, в результате которого основное состояние находится в зоне тяжелых дырок. Большая эффективная масса дырок является основным недостатком такой системы, поскольку в этом случае коэффициент поглощения света мал и мала подвижность рожденных светом носителей заряда. Для увеличения фототока необходимо вовлечь в процессы фотопреобразования легкие дырки.

В гетероструктурах с рассогласованием параметров решетки возникает дополнительный фактор,

[1] e-mail: yakimov@isp.nsc.ru

влияющий на взаимное расположение дырочных зон и связанный с упругими деформациями. Смещение краев HH и LH под действием деформации можно записать как [8]

$$\Delta E_{\mathrm{HH}} = |b|\varepsilon_b, \tag{2}$$

$$\Delta E_{\mathrm{LH}} = -\Delta E_{\mathrm{HH}} - 0.5[(\Delta_0 - \Delta E_{\mathrm{HH}}) - \sqrt{(\Delta_0 - \Delta E_{\mathrm{HH}})^2 + 8(\Delta E_{\mathrm{HH}})^2}], \tag{3}$$

где b – деформационный потенциал, $\varepsilon_b = \varepsilon_{zz} - 0.5(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})$ – двуосная деформация, ε_{ii} – диагональные компоненты тензора напряжений, Δ_0 – величина спин-орбитального расщепления. До настоящего времени исследования в этом направлении ограничивались сжатыми в плоскости роста КЯ из-за отработанной технологии формирования таких систем. Так, например, в гетероструктурах Si/SiGe деформации сжатия в КЯ SiGe возникают при осаждении тонких слоев SiGe непосредственно на Si [9–12]. Поскольку в этом случае $\varepsilon_b > 0$, в сжатых КЯ положительное расщепление подзон HH и LH ($\Delta E = \Delta E_{\mathrm{HH}} - \Delta E_{\mathrm{LH}}$) лишь усиливается.

Теоретически на возможность инверсии расположения дырочных зон и формирования основного состояния системы в зоне легких дырок было указано в работе [13]. Идея состоит во введении слоев $\mathrm{Si}_{1-x}\mathrm{Ge}_x$ в матрицу релаксированного твердого раствора $\mathrm{Si}_{1-y}\mathrm{Ge}_y$. При выполнении условия $x < y$ квантовые ямы $\mathrm{Si}_{1-x}\mathrm{Ge}_x$ оказываются растянутыми в плоскости роста ($\varepsilon_b < 0$) из-за разных постоянных решетки $\mathrm{Si}_{1-x}\mathrm{Ge}_x$ и $\mathrm{Si}_{1-y}\mathrm{Ge}_y$. В результате LH-подзона сдвигается в сторону зоны проводимости и может расположиться выше подзоны HH. Следует отметить, что и в сжатых, и в растянутых КЯ появляется анизотропия эффективной массы дырки. В растянутой КЯ поперечная масса (масса вдоль оси z) меньше, а продольная – больше, чем в случае сжатой КЯ [13]. Бóльшая же масса в плоскости КЯ означает бóльшую плотность состояний. В результате уменьшения поперечной эффективной массы дырки в основном состоянии и роста плотности состояний следует ожидать увеличения коэффициента межподзонного поглощения света в гетероструктурах с растянутыми квантовыми ямами p-типа.

В работе [14] сообщалось о наблюдении фотопроводимости, связанной с возбуждением носителей заряда из подзоны легких дырок в растянутых КЯ SiGe. Однако никакой информации об эффективности таких переходов получено не было. В настоящей работе впервые исследовано поглощение поляризованного ИК-излучения в квантовых ямах SiGe трех типов: в ненапряженной КЯ, сжатой и растянутой. Обнаружено двукратное увеличение интенсивности поглощения света в области межподзонных переходов при растяжении квантовой ямы.

Образцы выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках p-Si с ориентацией (001) и полированными обеими сторонами. Активная область структуры состояла из пяти квантовых ям $\mathrm{Si}_{0.65}\mathrm{Ge}_{0.35}$, каждая из которых была заключена между двумя потенциальными барьерами Si и погружена в матрицу $\mathrm{Si}_{1-y}\mathrm{Ge}_y$ (рис. 1a). Температура

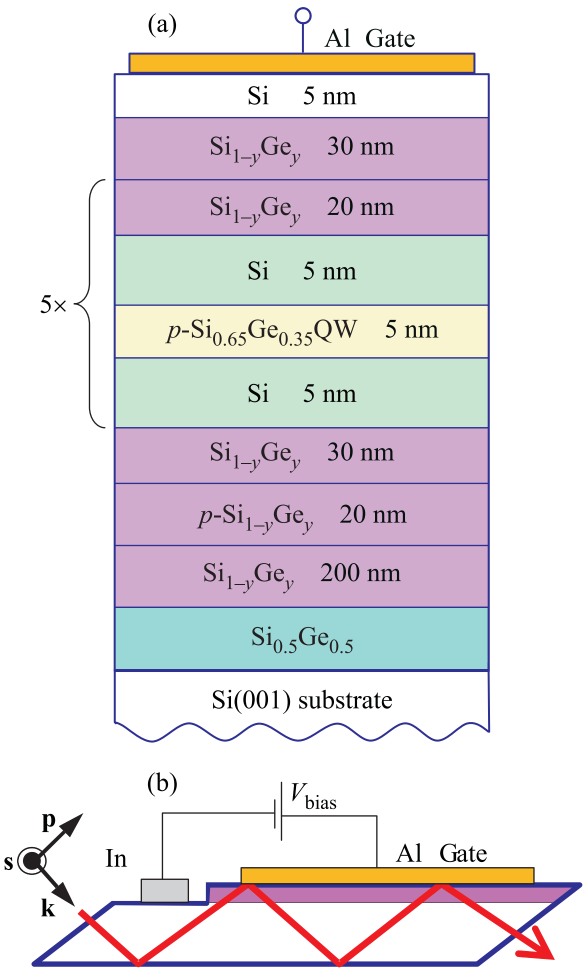

Рис. 1. (a) – Схематический разрез структур с квантовыми ямами $\mathrm{Si}_{0.65}\mathrm{Ge}_{0.35}$ в матрице $\mathrm{Si}_{1-y}\mathrm{Ge}_y$. (b) – Многопроходная геометрия измерений спектров модулированного пропускания излучения с s- и p-поляризацией

роста КЯ и кремниевых барьеров составляла 400 °C. Слои релаксированного твердого раствора $\mathrm{Si}_{1-y}\mathrm{Ge}_y$ осаждались при 550 °C. Квантовые ямы шириной 5 нм легировались бором до объемной концентрации $p = 5 \cdot 10^{17}\,\mathrm{см}^{-3}$. Знак и величина деформации квантовых ям определяются содержанием Ge в слоях $\mathrm{Si}_{1-y}\mathrm{Ge}_y$. В наших экспериментах значение y

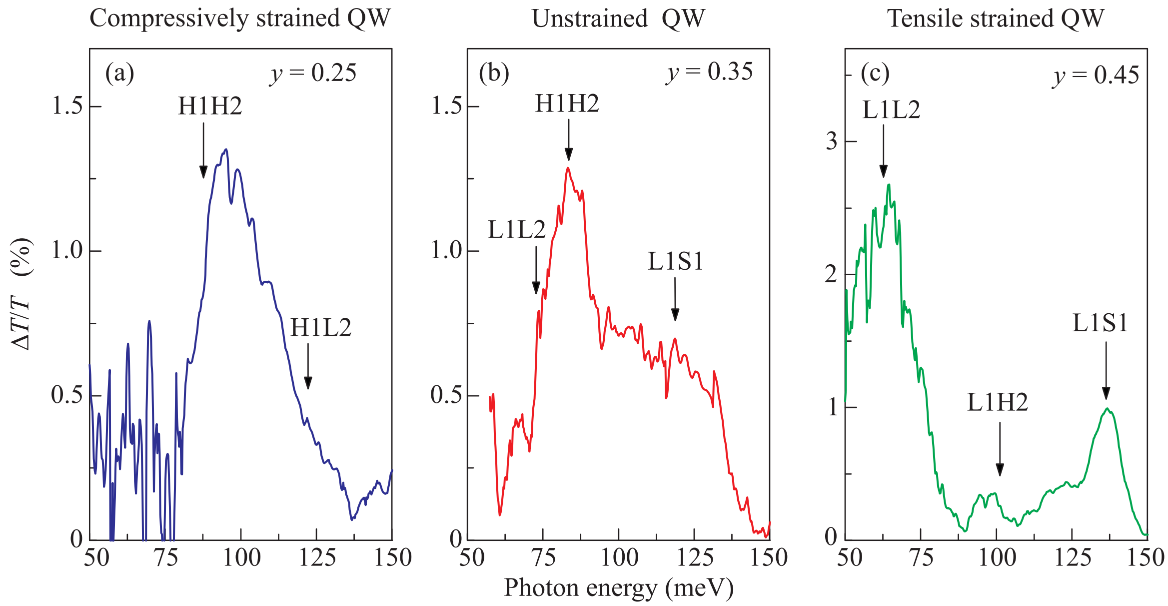

Рис. 2. Спектры модулированного пропускания излучения с TM-поляризацией для сжатой КЯ (a), ненапряженной КЯ (b) и растянутой КЯ (c). Вертикальными стрелками показано ожидаемое положение основных оптических резонансов, соответствующих межподзонным и межвалентным переходам дырок. Буквы H, L и S обозначают зоны тяжелых, легких и спин-отщепленных дырок соответственно. Цифры – номер подзоны размерного квантования

для трех типов образцов составляло $y = 0.25$, 0.35 и 0.45. В первом случае образец представлял собой пять сжатых КЯ ($y < 0.35$), во втором – ненапряженных ($y = 0.35$), в третьем – растянутых ($y > 0.35$).

Для уменьшения плотности дислокаций в слоях $Si_{1-y}Ge_y$ мы использовали метод обратноградиентных виртуальных подложек [15]. С этой целью на подложке Si(001) перед осаждением $Si_{1-y}Ge_y$ выращивался низкотемпературный (350 °C) частично релаксированный буфер $Si_{0.5}Ge_{0.5}$. Его роль – принять на себя как можно больше дефектов из последующего слоя $Si_{1-y}Ge_y$. Степень пластической релаксации любой пленки SiGe на Si зависит от ее толщины. В наших экспериментах толщина буфера выбиралась таким образом, чтобы постоянная решетки в его плоскости $a_{||}$ совпадала с постоянной решетки последующего ненапряженного слоя $Si_{1-y}Ge_y$. Она составляла 170 нм для $y = 0.25$, 255 нм для $y = 0.35$ и 330 нм для $y = 0.45$. Зависимость величины $a_{||}$ пленки $Si_{0.5}Ge_{0.5}/Si$ от ее толщины определялась в отдельных экспериментах с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света по методике, описанной в работе [16].

Для измерения поляризационных зависимостей коэффициента поглощения света торцы образца срезались и полировались под углом 45° к плоскости гетеропереходов (рис. 1b). Излучение падало нормально на скошенную поверхность и за счет внутреннего отражения 14 раз проходило через слои с квантовыми ямами. При этом вектор поляризации излучения может как лежать в плоскости КЯ (s-поляризация), так и быть направленным под углом 45° к этой плоскости (p-поляризация). В последнем случае вектор поляризации содержит равные компоненты в плоскости слоев и вдоль оси роста структур. Для того чтобы выделить внутризонные переходы, активные только в TM-поляризации (вектор электрического поля вдоль оси z), необходимо из сигнала, измеренного в p-поляризации, вычесть половину сигнала в s-поляризации. Измерения спектров пропускания проводились при температуре 83 K с помощью инфракрасного фурье-спектрометра Bruker Vertex 70 в режиме Step-Scan. Для получения линейно поляризованного света использовался поляризатор KPS-5.

Поскольку поглощение ИК-излучения квантовыми ямами мало, для его выявления на фоне артефактов применялась модуляционная методика [17, 18]. Для этой цели на поверхности образцов формировался затвор Шоттки, представляющий собой пленку Al площадью 0.15 см^2. Омические контакты получались вжиганием индия. Роль затвора состоит в модуляции степени заполнения КЯ дырками и, следовательно, коэффициента внутризонного поглощения. Модуляция осуществлялась прямоугольными импульсами напряжения с частотой 5 кГц и амплитудой до 2 В. Согласно данным емкостной спектроскопии это позволяло изменять концентрацию дырок в каждой из КЯ на величину $\sim 10^{11}\,\text{см}^{-2}$. Низкая плотность дырок в КЯ позволяла исключить из дальнейшего рассмотрения многочастичные эффекты [2]. Прошедшее через образцы излучение фиксировалось охлаждаемым жидким азотом широкополосным КРТ-детектором с использованием фазочувствительного детектирования. Измеренные спектры модулированного пропускания образцов ΔT нормировались на равновесные спектры пропускания T (в отсутствие модуляции концентрации дырок).

Измерения показали, что поглощение света s-поляризации во всех образцах мало (≤ 0.1 %). Это связано с экранированием Al затвором компоненты электрического поля излучения, лежащей в плоскости структур [19]. Максимум поглощения находится в области энергий фотонов 200–250 мэВ. Он обусловлен оптическими переходами дырок из основного состояния КЯ в сплошной спектр над барьером Si.

На рис. 2 приведены спектры $\Delta T/T$ поглощения излучения с TM-поляризацией. Стрелками показано ожидаемое положение основных оптических резонансов, рассчитанное в рамках шестизонного **kp**-приближения. Эффекты, связанные с упругими деформациями, были включены в задачу через гамильтониан Бира–Пикуса. В сжатой КЯ доминирующей является полоса поглощения H1H2 интенсивностью 1.3%, обусловленная переходами дырок между первыми двумя подзонами, H1 и H2, в зоне тяжелых дырок. В области энергий $\sim$120 мэВ наблюдается плечо, отвечающее межвалентному переходу в первое возбужденное состояние зоны легких дырок L2. Для ненапряженной КЯ, кроме резонанса H1H2 ($\sim 1.3\%$), наблюдается переход с участием двух низших по энергии подзон легких и спин-отщепленных дырок (линия L1S1), активный из-за присутствия тепловых дырок в LH-зоне (для образца с $y = 0.35$ расщепление $\Delta E \approx 10$ мэВ сравнимо с тепловой энергией $kT = 7$ мэВ).

В гетероструктуре с содержанием Ge в матрице $y = 0.45$ квантовые ямы подвергнуты растяжению в плоскости гетеропереходов. При этом спектр поглощения целиком состоит из линий, связанных с переходами из зоны легких дырок (рис. 2c). Максимальная интенсивность поглощения (2.6%) наблюдается для перехода между первыми двумя подзонами, L1 и L2. Амплитуда резонанса L1L2 в два раза превышает интенсивность перехода H1H2 в образцах с $y = 0.25$ и 0.35. Следует отметить, что именно двукратное различие поперечных эффективных масс легкой и тяжелой дырок для КЯ с близкими параметрами было продемонстрировано в работе [13]. Это обстоятельство позволяет сделать вывод о наблюдении инверсии расположения дырочных зон, вызванной деформацией растяжения, и о формировании основного состояния системы в зоне легких дырок.

В заключение хотелось бы рассмотреть вопрос о том, можно ли в структурах с инвертированным расположением дырочных зон ожидать большего увеличения коэффициента внутризонного поглощения света. Мы считаем, что ответ на него положителен. Дело в том, что во всех трех исследованных гетероструктурах кремниевые барьеры растянуты, несмотря на то, что знак деформации квантовых ям различен. При этом в образцах с бóльшим содержанием Ge в виртуальной подложке $Si_{1-y}Ge_y$ степень растяжения Si больше. Иными словами, с ростом y квантовые ямы $Si_{0.65}Ge_{0.35}$ становятся более мелкими. Это служит фактором, уменьшающим силу осциллятора для межзонных переходов. Ослабить нежелательный эффект растяжения слоев Si можно, введя в них Ge до концентраций x_{B}, удовлетворяющих условию $x_{\text{B}} < x_{\text{QW}} < y$, где x_{QW} – содержание Ge в КЯ. Однако данное обстоятельство требует дальнейшего тщательного теоретического анализа.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований # 12-02-00149. Авторы благодарны В.А. Володину за измерение спектров комбинационного рассеяния света, А.А. Блошкина за ознакомление с результатами расчетов зонной структуры и оптических матричных элементов в квантовых ямах SiGe.

1. L. C. West and S. J. Eglash, Appl. Phys. Lett. **46**, 1156 (1985).
2. R. J. Warburton, C. Gauer, A. Wixforth et al., Phys. Rev. B **53**, 7903 (1996).
3. Y.-C. Chang and R. B. James, Phys. Rev. B **39**, 12672 (1989).
4. H. Xie, J. Katz, and W. I. Wang, Appl. Phys. Lett. **59**, 3601 (1991).
5. S. K. Chun, D. S. Pan, and K. L. Wang, Phys. Rev. B **47**, 15638 (1993).
6. D. D. Coon and R. P.G. Karunasiri, Appl. Phys. Lett. **45**, 649 (1984).
7. R. P. G. Karunasiri, J. S. Park, K. L. Wang, and L. J. Cheng, Appl. Phys. Lett. **56**, 1342 (1990).
8. F. H. Pollak and M. Cardona, Phys. Rev. **172**, 816 (1968).
9. R. P. G. Karunasiri, J. S. Park, Y. J. Mii, and K. L. Wang, Appl. Phys. Lett. **57**, 2585 (1990).
10. M. L. W. Thewalt, D. A. Harrison, C. F. Reinhart et al., Phys. Rev. Lett. **79**, 269 (1997).

11. S. Tsujino, A. Borak, C. Falub et al., Phys. Rev. B **72**, 153315 (2005).
12. Y. Busby, M. De Seta, G. Capellini et al., Phys. Rev. B **82**, 205317 (2010).
13. L. G. Jiang, L. H. Kai, L. Cheng et al., Semicond. Sci. Technol. **23**, 035011 (2008).
14. P. Rauter, G. Mussler, D. Grützmacher, and T. Fromherz, Appl. Phys. Lett. **98**, 211106 (2011).
15. G. Capellini, M. De Seta, Y. Busby et al., J. Appl. Phys. **107**, 063504 (2010).
16. В. А. Володин, М. Д. Ефремов, А. С. Дерябин, Л. В. Соколов, ФТП **40**, 1349 (2006).
17. L. Diehl, H. Sigg, G. Dehlinger et al., Appl. Phys. Lett. **80**, 3274 (2002).
18. A. I. Yakimov, N. P. Stepina, A. V. Dvurechenskii et al., Phys. Rev. B **63**, 045312 (2001).
19. T. Fromherz, W. Mac, A. Hesse et al., Appl. Phys. Lett. **80**, 2093 (2002).