

# Оптическая спектроскопия экситона с пространственно разделенными электроном и дыркой в гетероструктуре Ge/Si с квантовыми точками германия

С.И. Покутний

*Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко НАНУ, ул. Генерала Наумова, 17, г. Киев, 03164, Украина*  
E-mail: pokutnyi.serg@gmail.com

Статья поступила в редакцию 31 октября 2017 г., после переработки 27 декабря 2017 г.,  
опубликована онлайн 27 июня 2018 г.

Показано, что учет центробежной энергии в гамильтониане экситона с пространственно разделенными электроном и дыркой (дырка движется в квантовой точке германия, а электрон локализован над сферической поверхностью раздела квантовая точка–матрица кремния) приводит к возникновению в зоне поверхностных экситонных состояний квазистационарных состояний, которые с ростом радиуса квантовой точки переходят в стационарные состояния. Установлено, что спектры межзонного поглощения наносистемой состоят из энергетических зон, которые формируются переходами электрона между квазистационарными и стационарными состояниями, а спектры внутризонного поглощения — из зон, обусловленных переходами электрона между стационарными состояниями.

Показано, що врахування відцентрової енергії в гамільтоніані екситону з просторово розділеними електроном і діркою (дірка рухається в квантовій точці германію, а електрон локалізований над сферичною поверхнею поділу квантова точка–матриця кремнію) призводить до виникнення в зоні поверхневих екситонних станів квазістаціонарних станів, які зі зростанням радіуса квантової точки переходять в стаціонарні стани. Встановлено, що спектри міжзонного поглинання наносистеми складаються з енергетичних зон, які формуються переходами електрона між квазістаціонарними та стаціонарними станами, а спектри внутрішньозонного поглинання — з зон, обумовлених переходами електрона між стаціонарними станами.

PACS: 73.21.-b Электронные состояния и коллективные возбуждения в многослойных структурах, квантовых ямах, мезоскопических и наноразмерных системах.

Ключевые слова: квазистационарные поверхностные состояния экситона, квантовые точки.

## Введение

Гетероструктуры Ge/Si с квантовыми точками (КТ) германия являются перспективными для создания новых элементов кремниевой оптоэлектроники, поскольку сигнал фотолюминесценции таких наноструктур в спектральной области 0,2–1,14 эВ наблюдался вплоть до комнатной температуры [1–4]. Гетероструктуры Ge/Si с КТ германия относятся к гетероструктурам второго типа. Такие наногетеросистемы характеризуются наличием значительных разрывов в валентной зоне и в зоне проводимости. В них основной электронный уровень расположен в матрице кремния, а основной дырочный уровень находится в КТ германия. Существенный раз-

рыв в валентной зоне вызывает локализацию дырок в КТ. Значительный разрыв в зоне проводимости является потенциальным барьером для электронов (электроны движутся в матрице и не проникают в КТ) [1–4]. При исследовании оптических свойств гетероструктур Ge/Si с КТ германия в экспериментальной работе [1] было обнаружено пространственное разделение электронов и дырок, в результате которого электроны локализовались над поверхностью КТ, а дырки двигались в КТ.

В [5–7] развита теория экситона с пространственно разделенными электроном и дыркой (дырка двигалась в полупроводниковой или диэлектрической КТ, а электрон локализован над сферической поверхности раздела КТ–матрица). Обнаружен эффект существенного

увеличения энергии связи экситона (почти на два порядка) в наносистемах, содержащих полупроводниковые (селенид цинка, германий) и диэлектрические (оксид алюминия) КТ, по сравнению с энергией связи экситона в соответствующих монокристаллах. Такой эффект существенного увеличения энергии связи экситона открывает возможность использования наносистем в качестве активной области нанолазеров, работающих на экситонных переходах при комнатных температурах.

Для создания на основе Ge/Si гетероструктур новых эффективных оптоэлектронных устройств необходимо изучение механизмов поглощения в таких наносистемах. В [1–3] осталась недостаточно выясненной природа полосы поглощения в инфракрасной области. Поэтому изучение механизмов поглощения в таких наносистемах является актуальным.

В настоящем сообщении обобщается теория экситона с пространственно разделенными электроном и дыркой (дырка движется в КТ германия, а электрон локализован над сферической поверхности раздела КТ–матрица кремния), развитая в [7], на случай, в котором в гамильтониане экситона учтена центробежная энергия. Показано, что учет в гамильтониане экситона центробежной энергии приводит к возникновению в зоне поверхностных экситонных состояний квазистационарных состояний, которые с ростом радиуса КТ переходят в стационарные состояния. Установлено, что механизмы оптического поглощения в гетероструктуре Ge/Si с КТ германия обусловлены межзонными переходами электрона между квазистационарными и стационарными состояниями, а также внутризонными переходами электрона между стационарными состояниями.

### Энергетический спектр экситона в наносистеме

Рассмотрим модель квазиульмерной наносистемы: сферическую КТ радиуса  $a$ , которая содержит в своем объеме германий с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_2 = 16,3$ , окруженную матрицей кремния с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_1 = 11,7$ . В КТ движется дырка  $h$  с эффективной массой  $m_h/m_0 = 0,39$ , а электрон  $e$  с эффективной массой  $m_e^{(1)}/m_0 = 0,98$  находится в матрице кремния ( $m_0$  — масса свободного электрона,  $r_e$  и  $r_h$  — расстояния электрона и дырки от центра КТ). В такой наносистеме основной электронный уровень расположен в матрице, а основной дырочный уровень находится в КТ. Упругие напряжения, возникающие в результате рассогласования по постоянным решетки германия и кремния, вызывают сдвиги зон проводимости и валентных зон в гетероструктуре Ge/Si [1–4]. Существенный сдвиг потолка валентной зоны  $\Delta E_{V(\text{Ge})} = 610$  мэВ КТ германия (относительно потолка валентной зоны матрицы кремния) вызывает локализацию дырок в КТ. Значительный сдвиг дна зоны проводимости  $\Delta E_{C(\text{Si})} = 340$  мэВ матрицы кремния (относительно дна зоны проводимости КТ германия) в гетероструктуре

является потенциальным барьером для электронов (электроны движутся в матрице и не проникают в КТ) [1–4]. Энергия кулоновского взаимодействия электрона с дыркой вызывает локализацию электрона в потенциальной яме над поверхностью КТ [7]. Для простоты будем считать, что дырка  $h$  с эффективной массой  $m_h$  находится в центре КТ (при этом  $r_h = 0$ ), а электрон  $e$  с эффективной массой  $m_e^{(1)}$  локализован над сферической поверхностью КТ в матрице ( $r_e = r$  — расстояние электрона  $e$  от центра КТ).

В изучаемой модели квазиульмерной наносистемы, в рамках вышеизложенных приближений, а также в приближении эффективной массы, гамильтониан экситона (с пространственно разделенными дыркой, движущейся в КТ, и электроном, находящимся в матрице) принимает вид

$$H(r, a) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_0} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + U_l(r, a) + (E_{g(\text{Ge})} - \Delta E_{c(\text{Si})}), \quad (1)$$

где первый член — оператор кинетической энергии экситона,  $\mu_0 = m_e^{(1)} m_h / (m_e^{(1)} + m_h)$  — приведенная масса экситона (с пространственно разделенными дыркой и электроном), второй член описывает эффективную потенциальную энергию экситона

$$U_l(r, a) = V_l(r) + V_{eh}(r) + U_{\text{pol}}(r, a), \quad (2)$$

$E_{g(\text{Ge})}$  — ширина запрещенной зоны германия. В эффективной потенциальной энергии экситона (2) член

$$V_l(r) = \frac{\hbar^2 L^2}{2\mu_0 r^2} \quad (3)$$

описывает центробежную энергию экситона (где  $L^2 = l(l+1)$ ,  $l = 0, 1, 2, \dots$  — орбитальное квантовое число электрона), а член

$$U_{\text{pol}}(r, a) = -\frac{e^2 \beta}{2\varepsilon_1 a} \frac{a^4}{r^2 (r^2 - a^2)} - \frac{e^2 \beta}{2\varepsilon_1 a} + \frac{e^2 \beta}{2\varepsilon_2 a} (2 + \varepsilon) \quad (4)$$

описывает энергию поляризационного взаимодействия электрона и дырки с поверхностью КТ, где параметры наносистемы  $\varepsilon = (\varepsilon_2 / \varepsilon_1)$  и  $\beta = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) / (\varepsilon_2 + \varepsilon_1)$  [5]. Вкладом энергии поляризационного взаимодействия электрона и дырки (4) с поверхностью КТ в эффективную потенциальную энергию экситона (2) в первом приближении можно пренебречь (поскольку диэлектрические проницаемости КТ и матрицы отличаются между собой незначительно) [7]. Поэтому в эффективной потенциальной энергии экситона  $U_l(r, a)$  (2) остается только энергия кулоновского взаимодействия электрона с дыркой  $V_{eh}(r)$ , которая описывается формулой [5]

$$V_{eh}(r) = \frac{e^2}{\tilde{\epsilon}r}, \quad (5)$$

где  $\tilde{\epsilon} = 2\epsilon_1\epsilon_2 / (\epsilon_1 + \epsilon_2)$ .

С ростом радиуса  $a$  КТ (так, что  $a \gg a_{ex}$ , где  $a_{ex} = \epsilon_2 \hbar^2 / (\mu e^2)$  — боровский радиус экситона,  $\mu = m_e^{(2)} m_h / (m_e^{(2)} + m_h)$  — приведенная масса экситона и  $m_e^{(2)}$  — эффективная масса электрона в германии), сферическая поверхность раздела КТ–матрица переходит в плоскую поверхность раздела. Экситон с пространственно разделенными электроном и дыркой становится двумерным [5,7]. Уравнение Шредингера с гамильтонианом (1) (при  $l = 0$ ) описывает двумерный экситон с пространственно разделенными электроном и дыркой, энергетический спектр которого имеет вид [8]

$$E_n = -\frac{Ry_{ex}^{2D}}{(n + (1/2))^2}, \quad Ry_{ex}^{2D} = \frac{(\epsilon_1 + \epsilon_2)^2}{4\epsilon_1^2 \epsilon_2^2} \left( \frac{\mu_0}{m_0} \right) Ry_0, \quad (6)$$

где  $n = 0, 1, 2, \dots$  — главное квантовое число экситона,  $Ry_0 = 13,606$  эВ — постоянная Ридберга. Боровский радиус и энергия связи основного состояния такого двумерного экситона, согласно (6), принимают вид

$$a_{ex}^{2D} = \frac{2\epsilon_1\epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{\hbar^2}{\mu_0 e^2}, \quad (7)$$

$$E_{ex}^{2D} = -4Ry_{ex}^{2D}. \quad (8)$$

Вклад центробежной энергии (при  $l \neq 0$ ) в эффективную потенциальную энергию  $U_l(r, a)$  (2) экситона создает положительный потенциальный барьер, максимальная величина которого

$$U^{\max}(l, S) \sim L^2 S^{-2} \quad (9)$$

для КТ большого радиуса  $S \gg 1$  (где  $S = a / a_{ex}^{2D}$  — безразмерный радиус КТ). Образование такого барьера означает, что наряду со стационарными состояниями экситона (с пространственно разделенными электроном и дыркой) с энергией  $E_{1,l}(S) < 0$  над сферической поверхностью КТ могут возникать и квазистационарные состояния экситона с энергией  $E_{1,l}(S) > 0$ . С ростом радиуса  $S$  КТ, начиная с величины  $S$  больше некоторого критического радиуса КТ  $S_c^*(1, l)$ , т.е. при

$$S > S_c^*(1, l), \quad (10)$$

сначала должны появляться квазистационарные состояния. При еще больших радиусах КТ

$$S > S_c(1, l) > S_c^*(1, l) \quad (11)$$

квазистационарные состояния должны переходить в стационарные состояния. Существование критических радиусов КТ  $S_c(1, l)$  и  $S_c^*(1, l)$  связано с размерными квантовыми эффектами, при которых с уменьшением

радиуса  $a$  КТ уменьшение эффективной потенциальной энергии  $U_l(r, a)$  (2) экситона не может компенсировать увеличение кинетической энергии электрона [5–7].

При  $S \geq \tilde{S}_c(1, l) \gg 1$  стационарные состояния переходят в состояния двумерного экситона (с энергией  $E_{1,l}(a) = -E_{ex}^{2D}$  (8)), локализованного над плоской поверхностью раздела [5,7]. Энергетический спектр  $E_{1,l}(S)$  стационарных состояний экситона при этом ограничен снизу энергией  $-E_{ex}^{2D}$  (8). Из существования критического радиуса  $S_c^*(1, l)$  следует, что для КТ радиуса  $S$  энергетический спектр  $E_{1,l}(S)$  экситона ограничен сверху максимальным значением  $l^{\max}(1, S)$ , образуя зону поверхностных состояний, локализованных над сферической поверхностью раздела КТ–матрица, часть которой имеет квазистационарный характер. Такая зона поверхностных состояний экситона содержит конечное число уровней  $(1, l)$ , причем эта зона заканчивается уровнем  $1, l^{\max}(1, S)$ . Радиусу  $S_c^*(1, l)$  соответствует наибольшее допустимое значение энергии  $E_{1,l}^{\max}(S)$  основного состояния экситона при фиксированном  $l$ . Это максимальное значение энергии совпадает с  $U^{\max}(l, S = S_c^*(1, l))$  (9).

Определим энергию основного ( $n = 1$ ) состояния гамильтониана экситона (1) вариационным методом. Вводя стандартную замену радиальной волновой функции  $R_l(r) = \chi_l(r) / r$  основного состояния экситона, вариационную функцию  $\chi_l(r)$  зададим в виде

$$\chi_l(r) = A_l r(r-a) \exp(-j_l(r-a)/a),$$

$$A_l = 2(j_l / S)^{5/2} (a_{ex}^{2D})^{-5/2}, \quad (12)$$

где  $j_l(a)$  — вариационный параметр. Выбор волновой функции  $\chi_l(r)$  в виде (12) обеспечивает ее предельный переход при  $S \rightarrow \infty$ ,  $j_l / S \rightarrow \text{const}$  в волновую функцию электрона, локализованного над плоской поверхностью раздела [8]. Запишем среднее значение гамильтониана экситона (1) на волновых функциях (12):

$$E_{1,l}(a, j_l(a)) = \langle R_l(r) | H(r, a) | R_l(r) \rangle. \quad (13)$$

Волновая функция  $R_l(r)$  (12) является огибающей волновой функцией, описывающей относительное движение электрона и дырки в экситоне (с пространственно разделенными электроном и дыркой).

Результаты вариационного расчета энергии  $E_{1,l}(a)$  (13) основного состояния ( $n = 1$ ) экситона здесь получены для наносистемы (которая исследовалась в условиях экспериментов [1–4]), содержащей КТ германия, выращенные в матрице кремния, со средними радиусами  $a$  КТ в интервале

$$6,54 \text{ нм} \leq a \leq 22 \text{ нм}. \quad (14)$$

На рис. 1 изображена зависимость  $E_{1,l}(a)$  (13) для состояний  $n = 1$ ,  $l = 0, 1, 2, 3$  вместе с границей спектра квазистационарных состояний  $E_{1,l}^{\max}(a)$ . Полученные

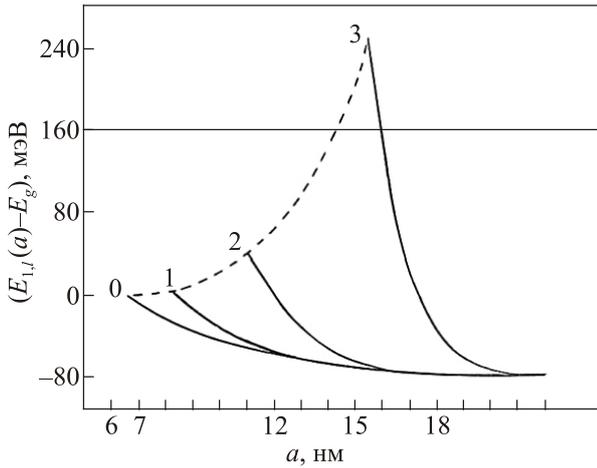


Рис. 1. Зависимость энергетического спектра  $E_{1,l}(a) - E_g$  экситона (с пространственно разделенными электроном и дыркой) в состоянии  $n = 1, l = 0, 1, 2, 3$  (где  $n$  и  $l$  — главное и орбитальное квантовые числа электрона) (сплошная линия) от радиуса  $a$  КТ германия, помещенной в матрицу кремния. Цифры при кривых указывают значение  $l$ . Пунктиром обозначена граница спектра квазистационарных состояний  $E_{1,l}^{\max}(a)$  экситона. Здесь  $E_g$  — ширина запрещенной зоны в матрице кремния,  $E_{ex}^{2D} = 82$  мэВ — энергия связи основного состояния двумерного экситона с пространственно разделенными электроном и дыркой.

результаты (см. рис. 1) иллюстрируют обсуждавшиеся выше качественные особенности рассматриваемых зависимостей  $E_{1,l}(a)$  (13). Критические радиусы КТ для указанных состояний ( $n = 1, l \leq 3$ ) имеют соответственно значения

$$a_c^*(1, l) = 8,04 \text{ нм}; 11,1 \text{ нм}; 15,5 \text{ нм},$$

$$a_c(1, l) = 6,54 \text{ нм}; 8,35 \text{ нм}; 11,95 \text{ нм}; 17,34 \text{ нм}. \quad (15)$$

В зоне проводимости матрицы кремния, начиная с радиуса  $a$  КТ

$$a_c^*(1, l) \leq a \leq a_c(1, l), \quad (16)$$

возникает зона квазистационарных состояний экситона (с пространственно разделенными электроном и дыркой) (см. рис. 2, область 2). Наименьшее значение радиуса  $a_c^*(1, l)$  КТ, при котором появляются квазистационарные состояния экситона (в состоянии  $n = 1, l = 1$ ), согласно (15), равно  $a_c^*(1, 1) \cong 8,04$  нм, тогда как наибольший радиус КТ  $a_c^*(1, l)$ , при котором возникает квазистационарное состояние экситона (в состоянии  $n = 1, l = 3$ ),  $a_c^*(1, 3) \cong 15,5$  нм. Квазистационарные состояния экситона ограничены сверху границей спектра  $E_{1,l}^{\max}(a)$  квазистационарных состояний. Величина  $E_{1,l}^{\max}(a)$  принимает максимальное значение в состоянии  $n = 1, l = 3$ , при этом  $E_{1,l=3}^{\max}(a = a_c^*(1, 3)) \cong 248,4$  мэВ (см. рис. 1). Поскольку гамильтониан (1) записан в предположении, что зона проводимости и валентная зона в гетероструктуре Ge/Si имеют параболическую форму,

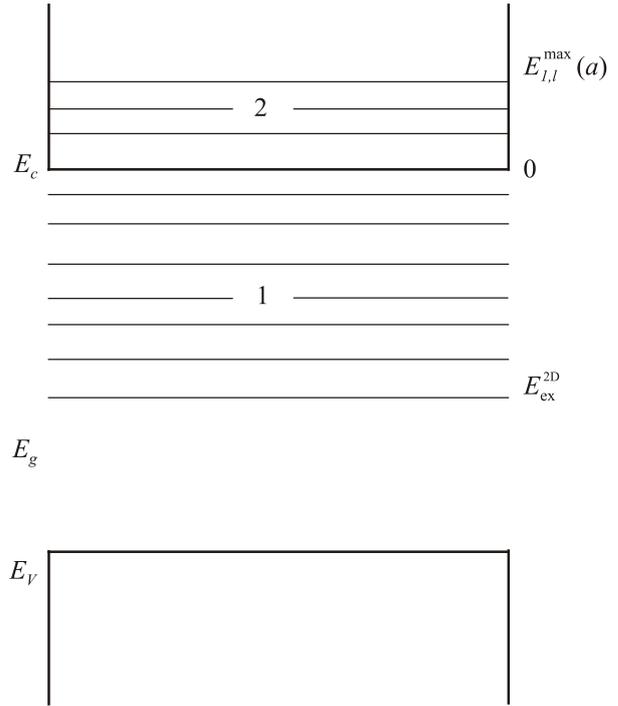


Рис. 2. Схематическое изображение энергетических уровней  $E_{1,l}(a)$  экситона (с пространственно разделенными электроном и дыркой) в состоянии  $n = 1, l \leq 3$  в наносистеме, содержащей КТ германия радиуса  $a$ , выращенные в матрице кремния. Стационарные состояния экситона (область 1) расположены в запрещенной зоне  $E_g$  матрицы кремния. Они ограничены снизу уровнем  $E_{ex}^{2D}$ , который является энергией связи основного состояния двумерного экситона (с пространственно разделенными электроном и дыркой) в наносистеме. Квазистационарные состояния экситона (область 2) находятся в зоне проводимости  $E_c$  матрицы кремния. Они ограничены сверху границей спектра квазистационарных состояний  $E_{1,l}^{\max}(a)$  (см. рис. 1). При этом дырка движется в валентной зоне КТ, а электрон расположен на энергетических уровнях (в областях 1 и 2).

энергии квазистационарных состояний экситона должны быть значительно меньше глубины  $\Delta E_{c(Si)}$  потенциальной ямы для неравновесного электрона в матрице Si (т.е.  $E_{1,l=3}^{\max}(a = a_c^*(1, 3)) \ll \Delta E_{c(Si)}$ ).

С ростом радиуса КТ при

$$a > a_c(1, l) > a_c^*(1, l) \quad (17)$$

квазистационарные состояния переходят в стационарные состояния. Наименший радиус КТ  $a_c(1, l)$ , при котором возникают стационарные состояния экситона (в состоянии  $n = 1, l = 0$ ), согласно (14),  $a_c(1, 0) \cong 6,54$  нм [7], тогда как наибольший радиус КТ  $a_c(1, l)$  (в состоянии  $n = 1, l = 3$ )  $a_c(1, 3) \cong 17,34$  нм. Зона стационарных состояний экситона (с пространственно разделенными электроном и дыркой) в наносистеме расположена в запрещенной зоне матрицы кремния (см. рис. 2, область 1). Стационарные состояния экситона ограничены снизу

уровнем  $E_{\text{ex}}^{2D} = 82 \text{ мэВ}$  (8), который определяет энергию связи основного состояния двумерного экситона с пространственно разделенными электроном и дыркой. В интервале радиусов КТ

$$a \geq \tilde{a}_c(1, l) = 20,84 \text{ нм} \quad (18)$$

стационарные состояния  $n = 1, l$  экситона переходят в состояние двумерного экситона (8), локализованного над плоской поверхностью раздела Ge-Si [7] (см. рис. 1).

Таким образом, в наносистеме, в которой радиус  $a$  КТ германия находится в интервале (14), энергетический спектр  $E_{1,l}(a)$  (13) экситона ограничен сверху максимальным значением орбитального квантового числа  $l^{\text{max}} = 3$ , образуя зону поверхностных состояний. Такая зона поверхностных состояний экситона состоит из стационарных и квазистационарных состояний и имеет конечное число уровней ( $n = 1, l \leq 3$ ), равное четырем.

Полученные результаты вариационного расчета энергии  $E_{1,l}(a)$  (13) основного состояния  $n = 1, l \leq 3$  экситона позволяют проследить переход от экситонных состояний, локализованных над сферической поверхностью КТ, к состояниям экситона, локализованным над плоской поверхностью раздела Ge-Si. Для КТ большого радиуса  $S$  (в пределе  $S \rightarrow \infty$ ) становятся допустимыми не только произвольные значения  $l$ , но и величины  $l/S$ , которые в пределах  $S, l \rightarrow \infty$  определяют конечный квазиимпульс  $p = \hbar k_{\parallel} = \hbar l / a$  «свободного» движения электрона, параллельного поверхности раздела. В результате выражение  $E_{1,l}(a)$  (13) переходит в спектр экситонных состояний, локализованных над плоской поверхностью раздела, который имеет вид

$$E_{1,l}(k_{\parallel}) = -E_{\text{ex}}^{2D} + (\hbar^2 k_{\parallel}^2) / 2\mu_0. \quad (19)$$

Все поверхностные состояния при этом становятся стационарными, поскольку при указанном предельном переходе потенциальный барьер (9) становится бесконечно широким, а его высота  $U^{\text{max}}(l, S) \rightarrow L^2 / S^2 = \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2\mu_0$  определяет кинетическую энергию «свободного» движения электрона над плоской поверхностью раздела.

### Оптическое поглощение наносистемой

В [4] с помощью метода электронно-лучевой литографии получены гетероструктуры, представляющие собой линейные цепочки КТ германия на подложках кремния. Средние радиусы  $a$  КТ германия не превышали 30 нм, а среднее расстояние между поверхностями КТ порядка  $d = 180$  нм. При расстояниях между поверхностями КТ порядка  $d$  взаимодействием между КТ в наноструктурах можно пренебречь. Оптические свойства таких наносистем в основном определялись энергетическими спектрами электрона и дырки, локализованными вблизи поверхности одиночных КТ германия, выращенных в матрице кремния [1–4,7].

Для оценок энергий переходов электрона в гетероструктуре Ge/Si с КТ германия будем считать, что КТ имели сферическую форму. Наиболее простыми методами изучения рассматриваемых экситонных состояний в такой гетероструктуре могут быть исследования межзонного (которое формируется переходами электрона в зоне поверхностных экситонных состояний между квазистационарными состояниями, расположенными в зоне проводимости матрицы кремния, и стационарными состояниями, находящимися в запрещенной зоне матрицы кремния), и внутризонного (которое вызывается переходами электрона между стационарными состояниями) поглощения (излучения) света (см. рис. 1 и 2). Такие переходы с изменением орбитального квантового числа  $l' = l \pm 1$  на единицу являются разрешенными правилами отбора. Энергия кванта для таких переходов

$$\Delta E_l^{l+1}(a) = E_{1,l+1}(a) - E_{1,l}(a), \quad (20)$$

где  $l$  меняется от 0 до 3. Исследование наносистемы возможно в процессах поглощения (излучения) на переходах с энергиями (20) при температурах  $T$ , удовлетворяющих условию

$$\Delta E_l^{l+1}(a) \gg k_B T, \quad (21)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана.

Рассмотрим картину возникновения переходов в наносистеме (см. рис. 1, 2). Начиная с радиуса КТ германия  $a \geq a_c^*(1, 1) \cong 8,04$  нм в интервале радиусов  $a$  КТ

$$a_c^*(1, 1) \leq a < a_c(1, 1) \cong 8,35 \text{ нм} \quad (22)$$

появляется межзонный переход между квазистационарными ( $n = 1, l = 1$ ) и стационарными ( $n = 1, l = 0$ ) состояниями с энергиями квантов в интервале

$$26,8 \text{ мэВ} < \Delta E_0^1(a) \leq 32 \text{ мэВ}. \quad (23)$$

С ростом радиуса  $a$  КТ в интервале радиусов

$$a_c(1, 1) \leq a \leq 12,2 \text{ нм} \quad (24)$$

наблюдается внутризонный переход между стационарными  $n = 1, l = 1$  и  $n = 1, l = 0$  состояниями с энергиями квантов в интервале

$$0 < \Delta E_0^1(a) \leq 26,8 \text{ мэВ}. \quad (25)$$

В интервале радиусов  $a$  КТ

$$a_c^*(1, 2) \cong 11,1 \text{ нм} \leq a < a_c(1, 2) \cong 11,95 \text{ нм}, \quad (26)$$

который входит в интервал (24), происходит межзонный переход между квазистационарными ( $n = 1, l = 2$ ) и стационарными ( $n = 1, l = 1$ ) состояниями с энергиями квантов в интервале

$$58,8 \text{ мэВ} < \Delta E_1^2(a) \leq 90,2 \text{ мэВ}. \quad (27)$$

Внутризонный переход между стационарными ( $n = 1, l = 2$ ) и ( $n = 1, l = 1$ ) состояниями наблюдается в интервале радиусов  $a$  КТ

$$a_c(1,2) \leq a \leq 16,0 \text{ нм} \quad (28)$$

с энергиями квантов в интервале

$$0 < \Delta E_1^2(a) \leq 58,8 \text{ мэВ}. \quad (29)$$

В интервале радиусов

$$a_c^*(1,3) \cong 15,5 \text{ нм} \leq a < a_c(1,3) \cong 17,34 \text{ нм} \quad (30)$$

происходит межзонный переход между квазистационарными ( $n = 1, l = 3$ ) и стационарными ( $n = 1, l = 2$ ) состояниями с энергиями квантов в интервале

$$76,2 \text{ мэВ} < \Delta E_2^3(a) \leq 325,4 \text{ мэВ}. \quad (31)$$

Внутризонный переход между стационарными ( $n = 1, l = 3$ ) и ( $n = 1, l = 2$ ) состояниями наблюдается в интервале радиусов

$$a_c(1,3) \leq a \leq \tilde{a}_c(1,1) = 20,84 \text{ нм} \quad (32)$$

с энергиями квантов в интервале

$$0 < \Delta E_2^3(a) \leq 76,2 \text{ мэВ}. \quad (33)$$

Следует отметить, что межзонные переходы с энергиями квантов в интервалах (27) и (31), а также внутризонные переходы с энергиями квантов в интервалах (29) и (33) могут наблюдаться и при комнатной температуре (условие (21) при этом выполняется).

Таким образом, в наносистеме, в которой средние радиусы  $a$  КТ германия изменяются в интервале

$$a_c^*(1,1) \leq a \leq \tilde{a}_c(1,1), \quad (34)$$

межзонные и внутризонные переходы создают энергетические зоны, лежащие в зоне проводимости и в запрещенной зоне матрицы кремния (см. рис. 1, 2). Энергии квантов  $\Delta E_l^{l+1}(a)$  (20) таких межзонных переходов достигают значений, существенно превосходящих энергию связи  $E_{\text{ex}}^{2D} = 82 \text{ эВ}$  (8) основного состояния двумерного экситона (см. рис. 1). Из таких энергетических зон формируются спектры поглощения (излучения), которые расположены в инфракрасном диапазоне длин волн. Такие спектры наблюдались в условиях экспериментов [1–4]. Межзонные переходы электрона между уровнями зоны поверхностных экситонных состояний в гетероструктуре Ge/Si с КТ германия — между стационарными состояниями и квазистационарными состояниями (см. рис. 1, 2), приводят к увеличению концентрации электронов в зоне проводимости матрицы кремния и, как следствие, к увеличению проводимости гетероструктуры Ge/Si с КТ германия.

Квазистационарные состояния  $n = 1, l = 3$  могут оказаться существенными в процессах рассеяния электронов

на КТ достаточно большого радиуса  $a \geq a_c^*(1,3) \cong 15,5 \text{ нм}$  и приводить к сильному подавлению подвижности электронов в зоне проводимости матрицы кремния (т.е. к эффекту отрицательной фотопроводимости [1–3]). Захват электронов на такие квазистационарные состояния при этом возможен и без изменения их полной энергии.

Таким образом, межзонные переходы электрона между квазистационарными состояниями, расположенными в зоне проводимости матрицы кремния, и стационарными состояниями, находящимися в запрещенной зоне матрицы кремния, и внутризонные переходы электрона между стационарными состояниями, при изменении средних радиусов  $a$  КТ в интервале (34), вызывают значительное поглощение (излучение) в инфракрасной области длин волн в интервалах энергий (23), (25), (27), (29), (31), (33) (причем интервал (31) содержится в спектральной области 0,2–1,14 эВ, наблюдавшейся в [1–4]) и обуславливают экспериментально установленное существенное размытие края поглощения [1–4].

### Заключение

Проведенные качественные оценки энергии  $E_{1,l}(a)$  (13) основного состояния экситона, а также энергий переходов электрона (23), (25), (27), (29), (31) и (33) получены в наносистеме без учета электрон-фононного взаимодействия. Учет электрон-фононного взаимодействия приводит к уширению квантоворазмерных энергетических уровней квазичастиц в наносистеме. Туннелирование электрона через потенциальный барьер высотой  $U^{\text{max}}(l,S)$  (9) также вызывает уширение квазистационарных уровней экситона. Будем предполагать, что такое уширение квазистационарных уровней повлияет на энергии межзонных переходов электрона несущественно.

Описана картина возникновения зоны поверхностных экситонных состояний в наносистеме, содержащей КТ германия, выращенные в матрице кремния [1–4]. Установлено, что с ростом радиуса КТ, начиная с величины  $a$  больше некоторого критического радиуса КТ  $a_c^*(1,l)$ , сначала появляются квазистационарные состояния, которые с увеличением радиуса КТ  $a \geq a_c(1,l) > a_c^*(1,l)$  переходят в стационарные состояния. Квазистационарные и стационарные состояния образуют зону поверхностных состояний экситона. Стационарные состояния экситона в наносистеме расположены в запрещенной зоне матрицы кремния (см. рис. 2, область 1). Они ограничены снизу уровнем  $E_{\text{ex}}^{2D}$ , который характеризует энергию связи основного состояния двумерного экситона. Квазистационарные состояния экситона находятся в зоне проводимости матрицы кремния (см. рис. 2, область 2). Они ограничены сверху границей спектра  $E_{1,l}^{\text{max}}(a)$ . Предложены механизмы формирования спектров межзонного и внутризонного поглощения (излучения) в наносистеме. Показано, что спектры межзонного поглощения (излучения) наносистемой со-

стоят из энергетических зон, которые формируются переходами электрона между квазистационарными и стационарными состояниями, а спектры внутризонного поглощения — из зон, которые обусловлены переходами электрона между стационарными состояниями.

1. А.И. Якимов, А.В. Двуреченский, А.И. Никифоров, *Письма в ЖЭТФ* **73**, 598 (2001).
2. А.В. Двуреченский, А.И. Якимов, *ФТП* **35**, 1143 (2001).
3. А.И. Якимов, А.В. Двуреченский, А.И. Никифоров, *Письма в ЖЭТФ* **72**, 267 (2000).
4. Ж.В. Смагина, А.В. Двуреченский, В.А. Селезнев, *ФТП* **49**, 767 (2015).
5. С.И. Покутний, *ФТП* **47**, 780 (2013) [*Semiconductors* **47**, 791 (2013)].
6. С.И. Покутний, Ю.Н. Кульчин, *ФТП* **49**, 1355 (2015) [*Semiconductors* **49**, 1311 (2015)].
7. С.И. Покутний, *ФНТ* **42**, 1471 (2016) [*Low Temp. Phys.* **42**, 1151 (2016)].
8. Ю.Е. Лозовик, В.Н. Нишанов, *ФТТ* **18**, 3267 (1976) [*Phys. Solid State* **18**, 1905 (1976)].

## Exciton spectroscopy with a spatially separated electron and a hole in a Ge/Si heterostructure with germanium quantum dots

S.I. Pokutnyi

It is shown that taking into account the centrifugal energy in the Hamiltonian of an exciton with a spatially separated electron and a hole (the hole moves at the germanium quantum dot and the electron is localized above the spherical interface quantum dot–silicon matrix) leads to the appearance in the zone of surface exciton states of quasistationary states that with increasing radius of the quantum dot go into stationary states. It is established that the spectra of interband absorption by a nanosystem are composed of energy bands formed by electron transitions between quasistationary and stationary states, and intraband absorption spectra from zones due to electron transitions between stationary states.

PACS: 73.21.–b Electron states and collective excitations in multilayers, quantum wells, mesoscopic, and nanoscale systems.

Keywords: quasistationary surface states of an exciton, quantum dots.