

# Определение состава и механических деформаций в $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$ -гетероструктурах из данных спектроскопии комбинационного рассеяния света: уточнение параметров модели

© В.А. Володин<sup>¶</sup>, М.Д. Ефремов, А.С. Дерябин, Л.В. Соколов

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук, 630090 Новосибирск, Россия

(Получена 3 февраля 2006 г. Принята к печати 17 марта 2006 г.)

Метод спектроскопии комбинационного рассеяния света использовался для контроля состава и деформаций пленок твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  с  $0.17 \leq x \leq 1.0$ . Состав и деформации в пленках были определены также из данных дифракции рентгеновских лучей. В спектрах комбинационного рассеяния анализировалось не только положение, но и интенсивность пиков рассеяния на колебаниях Ge–Ge-, Ge–Si- и Si–Si-связей. Это позволило существенно уточнить некоторые параметры модели для расчета состава и деформаций в гетероструктурах  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(100)$  из данных спектроскопии комбинационного рассеяния.

PACS: 63.22.+m, 81.15.Hi, 78.30.Am

## 1. Введение

Интерес к получению и исследованию бездефектных пленок твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$  на подложках из кремния связан с практической значимостью подобных структур для создания транзисторов с высокой подвижностью носителей заряда в канале. В таких приборах канал представляет собой тонкий (10 нм), напряженный слой кремния (при  $x < 0.3$ ) или германия (при  $x > 0.6$ ), выращенный на буферном слое из твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ . Вследствие значительных механических напряжений растяжения для Si (сжатия для Ge), приводящих к расщеплению долин, подвижность носителей заряда может в несколько раз превышать значение для ненапряженного материала [1]. Поскольку спектр колебаний решетки в значительной степени зависит от атомарного состава пленок и величины механических деформаций в них, представляется уместным использование спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) для оценки этих параметров.

Спектроскопия КРС является экспрессной, информативной и неразрушающей методикой [2]. Первые попытки анализа состава и механических напряжений в твердых растворах  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$  были предприняты еще в шестидесятых годах прошлого века [3], методика совершенствовалась и развивалась [4–9], однако до сих пор остались методические сложности, приводящие к неоднозначности интерпретации получаемых результатов [10].

Таким образом, цель работы — формулирование уточненного параметрического описания зависимости интенсивности и положения пиков КРС от состава и остаточных механических деформаций в пленках твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$  на подложках кремния с ориентацией (100).

## 2. Эксперимент

Экспериментальные образцы были изготовлены с применением молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на подложке Si с ориентацией (100). После стандартной процедуры химической очистки (вариант RCA) подложка Si (100) загружалась в ростовую камеру МЛЭ. Удаление защитного, химически нанесенного, окисла кремния проводилось при температуре 700°C в слабом (0.02 нм/с) потоке Si. Следующим этапом было выращивание буферного слоя кремния толщиной 50 нм с целью получения максимально чистой ростовой поверхности. Чистая поверхность Si (100) имела сверхструктурную перестройку типа  $2 \times 1$ . После наблюдения такой перестройки поверхности с помощью ДБЭ осуществлялся рост пленок твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ , для получения которых использовалась методика низкотемпературной МЛЭ [11,12]. Скорость выращивания слоев твердых растворов составляла около 0.1 нм/с. Толщина пленок варьировалась от 200 до 500 нм. Состав и остаточные механические напряжения в полученных структурах контролировались с помощью методики дифракции рентгеновских лучей. Для этого использовался анализ кривых качания дифракции рентгеновских лучей, снятых в нескольких, разрешенных для Si рефлексах (например, (113) и (004)).

Для изучения тонких пленок  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$  методом КРС предпочтительно использование длин волн лазерного излучения сине-зеленого диапазона вследствие малой глубины поглощения света (менее 10 нм). При этом в спектрах КРС присутствует информация только о верхнем слое.

Спектры КРС регистрировались при комнатной температуре с помощью автоматизированной установки на базе спектрометра ДФС-52 (ЛОМО, Санкт-Петербург), с использованием линии Ar-лазера 514.5 нм (2.41 эВ). Была использована геометрия квазиобратного рассеяния. Падающий свет был поляризован вдоль кристалло-

<sup>¶</sup> E-mail: Volodin@isp.nsc.ru

графического направления  $\langle 001 \rangle$ , рассеянный свет регистрировался в поляризации  $\langle 010 \rangle$ . Выбор такой геометрии обусловлен тем, что она является разрешенной для рассеяния на LO (продольных оптических) фононах в германии и кремнии и запрещенной для двухфононного рассеяния на TA (поперечных акустических) фононах от подложки кремния. Это позволило избавиться от сложностей в интерпретации спектров КРС, рассмотренных в работе [13].

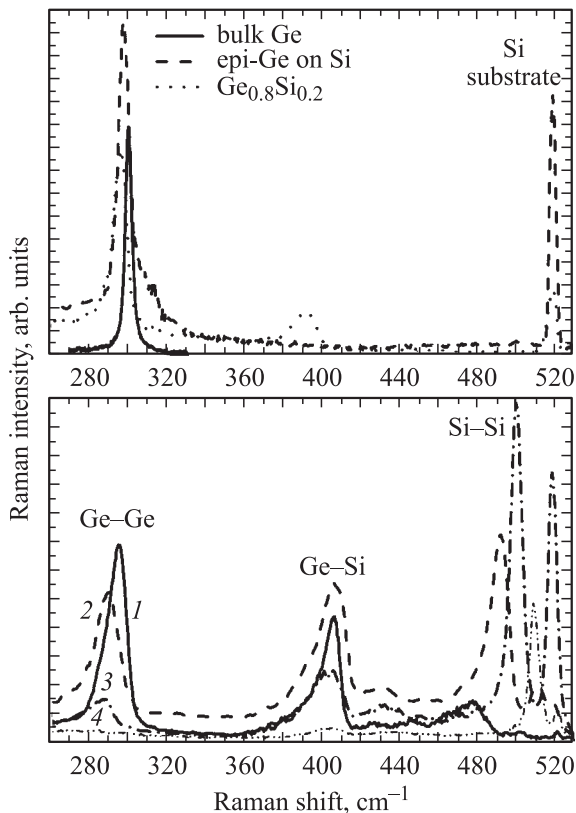
### 3. Результаты и обсуждение

На рис. 1 приведены спектры КРС пленок чистого германия и твердых растворов германий/кремний в области частот оптических колебаний связей Ge–Ge (около  $300 \text{ cm}^{-1}$ ), Ge–Si (около  $400 \text{ cm}^{-1}$ ) и Si–Si (около  $500 \text{ cm}^{-1}$ ). Видно, что пик КРС на колебаниях Ge–Ge-связей пленки германия, выращенной на кремниевой подложке, смещен в сторону меньших частот (примерно на  $2 \text{ cm}^{-1}$ ) и уширен. Для кремния и германия растягивающие напряжения приводят к сдвигу частот фононов в сторону меньших энергий. Растягивающие напряже-

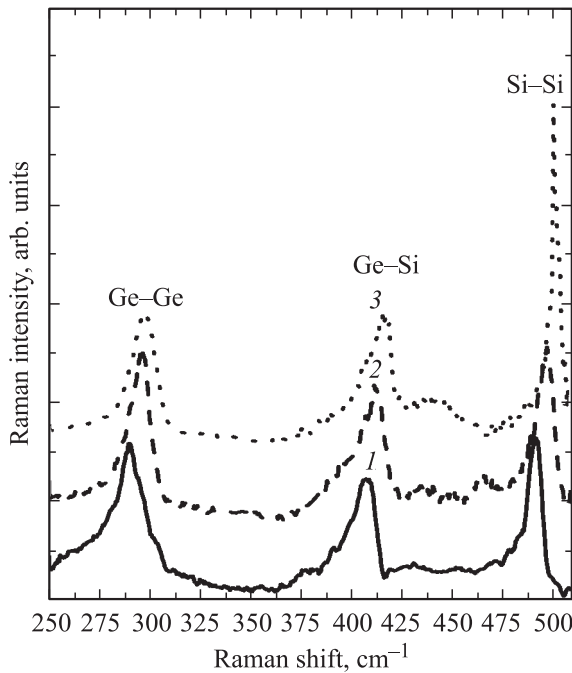
ния в пленках германия на кремнии могут возникать при охлаждении гетероструктуры за счет различных коэффициентов температурного расширения германия и кремния. Если структурные напряжения релаксировали в процессе роста при температуре эпитаксии, то при охлаждении образца в пленке могут появиться растягивающие напряжения. Наблюдаемое высокочастотное плечо может быть обусловлено наличием локальных механических напряжений сжатия вблизи дислокаций. На спектре пленки  $\text{Ge}_{0.8}\text{Si}_{0.2}$  виден также пик от рассеяния на колебаниях связей Ge–Si ( $\sim 395 \text{ cm}^{-1}$ ).

В нижней части рис. 1 приведены спектры КРС пленок  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$  различного состава ( $0.17 \leq x \leq 0.63$ ). Релаксация механических напряжений в пленках составляла  $> 0.71$ . Степень релаксации — параметр, определенный из анализа кривых качания рентгеновской дифракции, определяется следующим образом. Согласно закону Вегарда, постоянная решетки в твердых растворах линейно изменяется при изменении состава. Таким образом, несоответствие постоянных решетки твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$  и Si можно записать как  $f = 0.042x$ , так как несоответствие постоянных решетки Ge и Si составляет 4.2%. Для образцов, толщина которых много меньше их планарных размеров, тензоры деформаций и напряжений можно считать аксиально-симметричными, т.е.  $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma$ ,  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon$  (ось  $z$  направлена перпендикулярно подложке). Из-за того, что поверхность гетероструктуры свободна,  $\sigma_{zz} = 0$ . Тензор деформаций  $\varepsilon_{ij}$  связан с тензором механических напряжений посредством тензора упругости четвертого ранга, который в кристалле с симметрией типа алмаза имеет три независимые компоненты. Оценка максимального значения структурной деформации сжатия, возникающей в пленке за счет несоответствия решеток, дает значение  $\varepsilon_{\text{max}} = -0.042x$ . Минус означает, что в направлениях  $x$  и  $y$  пленка сжата. Компонента тензора деформаций  $\varepsilon_{zz}$  будет при этом положительна. В частично релаксированных пленках  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  наблюдавшаяся деформация сжатия  $\varepsilon_{\text{exp}}$  меньше максимально возможного значения  $0.042x$ , и степень релаксации определяется как  $r = 1 - \varepsilon_{\text{exp}}/\varepsilon_{\text{max}}$ . Таким образом, если  $r = 1.0$ , то пленка полностью релаксирована, а если  $r = 0$ , то пленка псевдоморфна. Как уже было отмечено, если пленка релаксирована при температуре роста, то вследствие разности коэффициентов теплового расширения она может быть напряжена при комнатной температуре.

Методом КРС было исследовано около 30 образцов с разным составом пленок. На спектрах КРС (рис. 1) видна общая тенденция — при уменьшении параметра  $x$  растет относительная интенсивность пика рассеяния на Si–Si-связях, уменьшается относительная интенсивность пика рассеяния на Ge–Ge-связях, а пик рассеяния на Ge–Si-связях достигает максимума при  $x$ , примерно равном 0.5. На рис. 2 приведены спектры КРС пленок твердых растворов  $\text{Ge}_{0.44}\text{Si}_{0.56}$ , отличающихся величиной механической деформации (по данным дифракции рентгеновских лучей). Механические деформации сжатия



**Рис. 1.** Вверху показаны спектры КРС релаксированных пленок германия (штриховая линия) и твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$  (линия точек). Для сравнения показан спектр объемного германия (сплошная линия). Внизу показаны спектры КРС пленок твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$ : 1 —  $x = 0.63$ ,  $r$  (релаксация механических напряжений) = 0.90; 2 —  $x = 0.50$ ,  $r = 0.75$ ; 3 —  $x = 0.30$ ,  $r = 0.97$ ; 4 —  $x = 0.17$ ,  $r = 0.71$ .



**Рис. 2.** Спектры КРС пленок твердого раствора германия  $Ge_{0.44}Si_{0.56}$ : 1 —  $r = 0.97$ , 2 —  $r = 0.61$ , 3 —  $r = 0.30$ .

растут от образца 1 к образцу 3, при этом все три пика смещаются в сторону больших частот.

В предположении, что атомы германия и кремния в твердом растворе расположены в сетке узлов кристаллической решетки случайно, относительное количество связей различного типа зависит от состава  $x$  следующим образом:

$$N_{Ge-Ge} = x^2, \quad N_{Si-Si} = (1-x)^2, \quad N_{Ge-Si} = 2x(1-x). \quad (1)$$

Тогда, считая, что интегральные интенсивности пиков КРС при рассеянии на соответствующих связях пропорциональны их числу, были получены следующие отношения [8,9]:

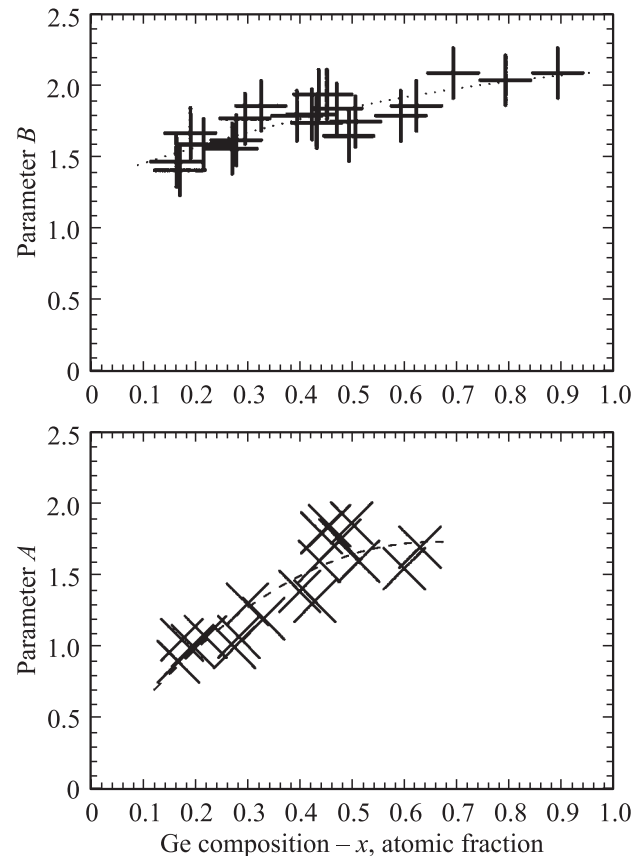
$$\frac{I_{GeGe}}{I_{GeSi}} = B \frac{x}{2(1-x)}, \quad \frac{I_{SiSi}}{I_{GeSi}} = A \frac{(1-x)}{2x}. \quad (2)$$

Параметры  $A$  и  $B$  зависят от производной поляризуемости связей по смещению, индуцированному фононами, от собственно величин смещения атомов, а также фактора Бозе–Эйнштейна. Для определения этих параметров были найдены интегральные интенсивности (площадь под пиками) с вычетом шумового фона. При этом пики с положением максимума от 280 до 300  $cm^{-1}$  относились к колебаниям Ge–Ge-связей, с положением максимума от 390 до 440  $cm^{-1}$  — к колебаниям Ge–Si-связей, а с положением максимума от 440 до 515  $cm^{-1}$  — к колебаниям Si–Si-связей. В некоторых спектрах (от полупрозрачных пленок) проявлялся также пик от подложки (520  $cm^{-1}$ ), который при анализе вычитался. Далее, по формуле (2), используя величину  $x$ , характеризующую состав пленок, полученную из данных дифракции

рентгеновских лучей, находились параметры  $A$  и  $B$ . Сводные данные по этим параметрам приведены на рис. 3. Массив данных был аппроксимирован полиномом 2-й степени от  $x$ :

$$A = 0.18 + 4.7x - 3.6x^2, \\ B = 1.34 + 1.3x - 0.5x^2. \quad (3)$$

Отклонения от этих зависимостей (на рис. 3 некоторые точки отстоят от аппроксимирующих кривых на расстояние, большее, чем точность в их определении) могут быть связаны с эффектами упорядочения в твердых растворах [14,15]. При этом количество связей всех типов отличается от их количества для случайного распределения атомов. Наблюдается также некоторая корреляция — параметры  $A$  и  $B$  слабо растут при релаксации механических напряжений в слоях. В работе [8] параметры  $A$  и  $B$  были определены для пленок состава  $0 \leq x \leq 0.4$  и составляли 1.85 и 3.2 соответственно. Теми же авторами в работе [9] было найдено отклонение этих параметров от определенных ранее величин для пленок с более высоким содержанием Ge. Это может быть связано с тем, что поляризуемость связей различного типа зависит от длины волны возбуждающего света, а в работах [8,9] для возбуждения КРС использовались линии  $Ag^+$ -лазера 457.9 и 514.5 нм соответственно. Как



**Рис. 3.** Параметры  $A$  и  $B$  из формулы (2) определены для КРС на длине волны 514.5 нм.

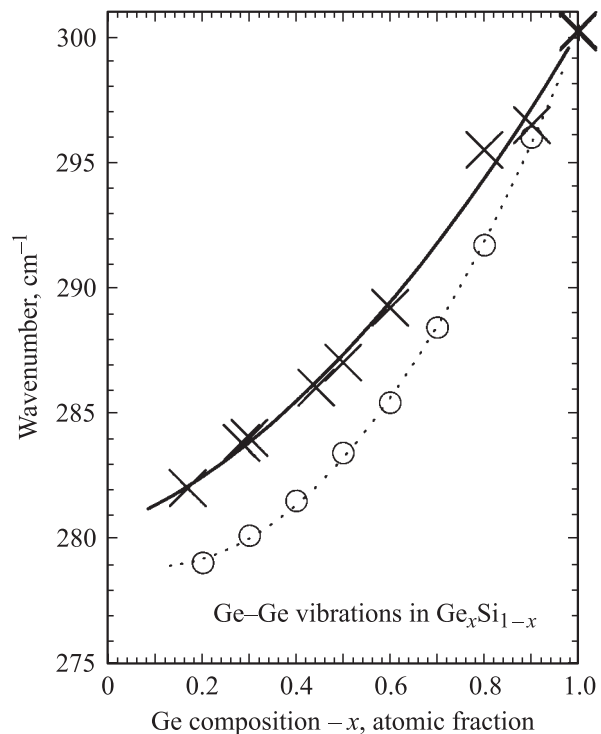
отмечают авторы этих работ, резонансные явления могут сказываться на производной поляризуемости связей от смещения, индуцированного фононами. Проанализировав литературные данные, авторы работы [10] нашли значения для параметра  $B$ , варьиовавшиеся от 1 до 3.2, для гетероструктур на основе Ge/Si.

Проведение нами эксперимента по КРС в одинаковых условиях ( $\lambda = 514.5$  нм, комнатная температура, плотность накачки  $\sim 1$  кВт/см<sup>2</sup>) позволило уточнить оба параметра, а также установить их зависимость от состава. Таким образом, состав пленок Ge<sub>*x*</sub>Si<sub>*1-x*</sub> можно определить из следующей процедуры. Измеряется отношение интегральных интенсивностей пиков КРС при рассеянии на соответствующих связях, при этом начальные значения  $A$  и  $B$  берутся в диапазоне, ясном из рисунка. По формуле (2) определяется состав, а по нему уточняются параметры  $A$  и  $B$ . Процедура повторяется до достижения сходимости.

В некоторых работах авторы пытались определить состав пленок из положения пиков КРС [4–6]. Основная методическая сложность этого подхода заключается в том, что положение пиков зависит от механических напряжений (сдвиг может достигать 17 см<sup>-1</sup> для пика Ge–Ge и 35 см<sup>-1</sup> для пика Si–Si). Другой сложностью является то, что, если содержание кремния в гетероструктурах мало, пик КРС на колебаниях Si–Si-связей практически не виден, и его положение невозможно определить.

Для определения зависимости положения пиков КРС от состава пленок было проведено численное моделирование спектров КРС. В приближении циклических граничных условий были рассчитаны собственные частоты и собственные вектора колебаний в твердых растворах Ge/Si в модели Борна, затем из полученных данных были рассчитаны спектры КРС в модели аддитивной поляризуемости связей Волькенштейна [16]. Константы жесткости связей для германия в модели Борна были определены из аппроксимации вычисляемой дисперсии фононов в объемном материале к экспериментальным данным, полученным из данных по рассеянию медленных нейтронов [17]. Так как дисперсии фононов для германия и кремния очень похожи, для построения гетероструктур Ge/Si использовался метод массозамещения. Твердый раствор моделировался случайным заполнением элементарной ячейки атомами германия и кремния с необходимым соотношением  $x$ . Чтобы избежать влияния периодических граничных условий, для расчетов была выбрана достаточно большая элементарная ячейка, содержащая 432 атома. Отношение производных поляризуемости связей для германия и кремния было определено из нормированных на рассеивающий объем соотношений интенсивностей КРС для германия и кремния. Более подробно детали расчетов приведены в работах [18,19].

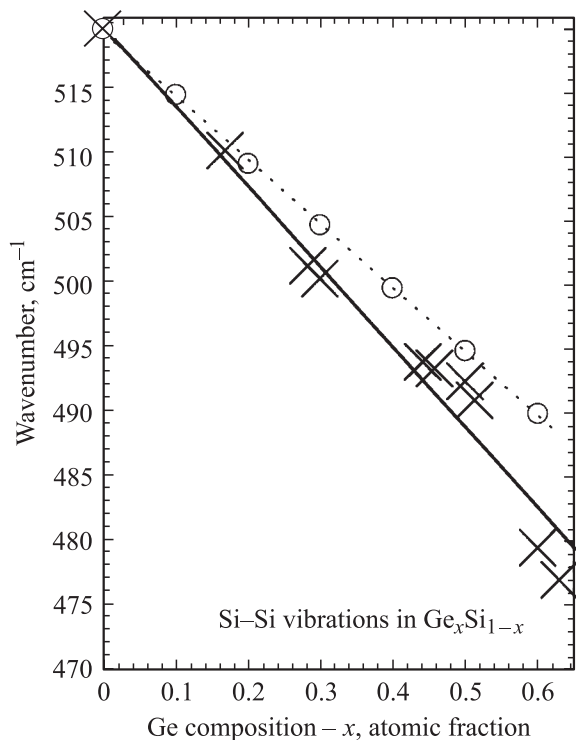
По литературным данным, для объемного германия положение пика КРС на оптических фононах составляет 300–302 см<sup>-1</sup>. В исследуемом нами германии марки



**Рис. 4.** Положение пика КРС на колебаниях Ge–Ge-связей при уменьшении доли германия  $x$  (без учета механических напряжений). Кружки и прерывистая линия — рассчитанные данные. Крестики и непрерывная линия — экспериментальные данные.

ГЭС-40 положение данного пика составляло 300.3 см<sup>-1</sup>. Дисперсия оптических фононов такова, что эффекты локализации приводят к уменьшению их частот. Фононы с частотами, присущими оптическим колебаниям Ge–Ge-связей, рассеиваются и демпфируются более легкими атомами кремния и становятся локальными. Действительно, на рис. 4 наблюдается соответствующий сдвиг частот при уменьшении доли германия  $x$ . Кружками и прерывистой линией на рисунке показаны рассчитанные данные. Крестами и непрерывной линией показаны экспериментальные данные. Экспериментальные данные брались для пленок с максимальной релаксацией механических напряжений, а положение пика поправлялось с учетом оставшихся механических напряжений по процедуре, которая будет изложена далее. Видно некоторое отклонение модели и эксперимента, которое связано с несовершенством модели.

На рис. 5 представлены данные по положению пика КРС на колебаниях Si–Si-связей. Видна схожая картина, положение пика сдвигается в область меньших частот при уменьшении доли кремния. Так как частота оптических фононов в кремнии сильно зависит от волнового вектора, а более тяжелые атомы германия эффективней демпфируют высокочастотные колебания, зависимость от  $x$  в данном случае более крутая, чем для Ge–Ge-связей. Аппроксимация экспериментальных данных дает



**Рис. 5.** Положение пика КРС на колебаниях Si–Si-связей при уменьшении доли кремния (без учета механических напряжений). Кружки и прерывистая линия — рассчитанные данные. Крестики и непрерывная линия — экспериментальные данные.

следующие результаты:

$$\begin{aligned} \omega_{Ge-Ge} &= 300.3 - 32(1-x) + 12(1-x)^2, \\ \omega_{Si-Si} &= 520 - 62x. \end{aligned} \quad (4)$$

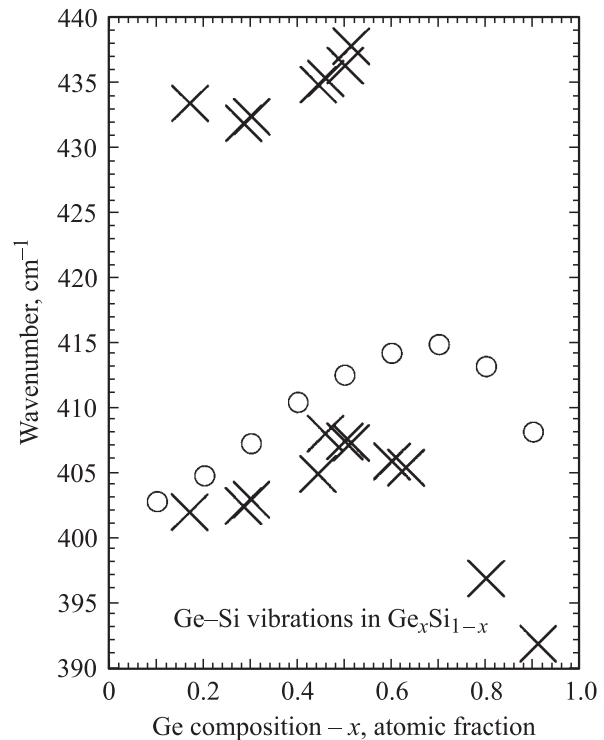
Были также проведены расчеты положения пиков КРС на колебаниях Ge–Si-связей. Результаты расчетов (также без учета механических напряжений) и экспериментальные данные приведены на рис. 6. Необходимо отметить, что для пленок с составом  $0.17 < x < 0.5$  в диапазоне частот колебаний Ge–Si-связей явно наблюдались 2 пика — около 400–410 и 430–440  $cm^{-1}$ . В работе Алонсо и Винера [6] утверждается, что пик в районе 440  $cm^{-1}$  связан с рассеянием на локальных колебаниях двух атомов в окружении германия. В наших расчетах мы также наблюдаем слабые пики в районе 440–450  $cm^{-1}$ . Анализ собственных векторов колебаний показывает, что эти моды — смешанные колебания связей Ge–Si и локальных колебаний атомов кремния продольного типа. Поэтому при анализе интегральных интенсивностей мы отнесли их к Ge–Si-связям. Для пленок с составом  $0.5 < x < 0.8$  диапазоны частот локальных колебаний атомов кремния и колебаний Ge–Si-связей частично перекрывались, что создавало сложности для анализа интенсивностей пиков КРС. Для более детального анализа необходимо построение более сложной модели, с учетом кулоновского взаимодействия.

Известно, что химические характеристики (в частности, электроотрицательность) элементов германия и кремния различаются. В паре германий–кремний атом кремния сильнее притягивает валентные электроны, и, как результат, такая связь должна быть полярной, что необходимо учитывать в расчетах.

Вернемся к анализу влияния механических напряжений. Механические напряжения сжатия приводят к увеличению частоты колебаний. В основном этот эффект обусловлен тем, что при сжатии изменяется длина связи, а вследствие ангармонизма, от длины зависит жесткость связи. При гидростатическом давлении связь между частотами колебаний и объемом кристалла выражается посредством параметра Грюнайзена:

$$\gamma = -\frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln V}. \quad (5)$$

В работе [20] приведены эмпирические выражения для зависимости частот колебаний всех типов для твердых растворов  $Ge_xSi_{(1-x)}$  с составом  $x \leq 0.4$  в зависимости от  $x$  и деформации  $\varepsilon = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ . Однако, как было показано в работе [21], параметр Грюнайзена также зависит от состава. С уменьшением  $x$  от 1 до 0 он меняется от 1.12 до  $\sim 1.3$  для Ge–Ge-связей и от  $\sim 1.5$  до 1.05 для Si–Si-связей. Тогда с учетом уточнения влияния механических напряжений и найденной зависимости от состава положение максимума пиков КРС при рассеянии на колебаниях различных связей будет



**Рис. 6.** Положение пика КРС на колебаниях Ge–Si-связей в зависимости от состава (без учета механических напряжений). Кружки — рассчитанные данные. Крестики — экспериментальные данные.

Состав и релаксация механических напряжений в пленках твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$ : сравнительный анализ данных дифракции рентгеновских лучей и данных КРС

По данным дифракции рентгеновских лучей		По данным КРС	
Атомарная доля Ge	Релаксация механических напряжений, %	Атомарная доля Ge	Релаксация механических напряжений, %
0.168	70.6	0.19	75
0.283	92.7	0.29	90
0.30	96.6	0.29	95
0.40	48.7	0.38	50
0.458	73.8	0.47	65
0.50	75	0.48	75
0.63	90.3	0.61	70
0.91	100	0.86	100

выражаться следующим соотношением:

$$\omega_{\text{SiSi}} = 520 - 62x - \Sigma_{\text{Si}}^{\text{stress}} \varepsilon,$$

$$\omega_{\text{GeGe}} = 300.3 - 32(1-x) + 12(1-x)^2 - \Sigma_{\text{Ge}}^{\text{stress}} \varepsilon. \quad (6)$$

Знак минус при коэффициентах  $\Sigma_{\text{Si}}^{\text{stress}}$  и  $\Sigma_{\text{Ge}}^{\text{stress}}$  означает, что при напряжениях сжатия ( $\varepsilon$  отрицательно) частоты колебаний растут. Из зависимости параметра Грюнаизена от состава [21] искомые коэффициенты с хорошей точностью можно аппроксимировать линейной функцией от состава  $x$ :

$$\Sigma_{\text{Si}}^{\text{stress}} = 700 + 160x; \quad \Sigma_{\text{Ge}}^{\text{stress}} = 450 - 30x. \quad (7)$$

Таким образом, определив содержание германия  $x$  из анализа интегральных интенсивностей пиков КРС, можно из формул (6) и (7) определить компоненту тензора деформации  $\varepsilon = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ , а затем найти ее отношение к максимально возможной в данной системе деформации и определить степень релаксации деформаций.

Предложенный подход можно применить и к квантовым точкам  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$  на Si. В этом случае необходимо (при их высоте менее 2 нм и латеральных размерах менее 2–3 нм) сделать поправку на влияние локализации фононов в квантовой точке. Сделать это можно, следуя подходу, изложенному в работе [22]. При определении состава квантовых точек необходимо также учесть, что даже в случае кластера из чистого германия на границе раздела всегда присутствуют связи германий–кремний, которые дают некоторый вклад в спектр КРС.

В заключение сравним результаты определения состава и механических напряжений в пленках  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$  методами рентгеновской дифракции КРС для пленок различного состава (см. таблицу). Для анализа были выбраны образцы, в которых экспериментально определенные параметры  $A$  и  $B$  наиболее сильно отклонялись от аппроксимирующей параболы (см. рис. 3), т.е. образцы, в которых точность определения параметров

была наихудшей. Из таблицы видно, что данные, полученные методом КРС и рентгеновской дифракции, соответствуют друг другу с вычисленной точностью  $\pm 0.025$  (при  $x < 0.2$  и  $x > 0.8$  точность несколько хуже). Точность определения релаксации механических напряжений составляет (в среднем) значение лучше, чем  $\pm 10\%$ . Преимуществом использования методики КРС перед методом, использующим рентгеновскую дифракцию, является возможность анализа тонких пленок (с толщиной от 10 нм).

## 4. Заключение

В результате нахождения и уточнения параметров и самой модели показано, что из данных КРС можно определять состав и механические напряжения в гетероструктурах  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}/\text{Si}$ . Предложенный подход можно также использовать для определения состава и степени релаксации механических напряжений в квантовых точках  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$ .

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 04-02-16362, 04-02-16747, 05-02-16800) и гранта президентской поддержки ведущей научной школы России НШ-533-2003-2.

Авторы признательны Д.А. Орехову и А.В. Ненашеву за помощь в расчетах, А.И. Якимову, Ю.Б. Болховитянову и А.Г. Милёхину за интерес к работе и дискуссии, а также М.А. Ревенко и А.В. Колесникову за проведение рентгеновских измерений.

## Список литературы

- [1] Ю.Б. Болховитянов, О.П. Пчеляков, Л.В. Соколов, С.И. Чикичев. ФТП, **37**, 513 (2003).
- [2] *Light Scattering in Solids V. Superlattices and Other Microstructures*, ed. by M. Cardona, G. Güntherodt (Berlin, Springer-Verlag, 1989) p. 351.
- [3] D.W. Feldman, M. Ashkin, J. H. Parker. Jr. Phys. Rev. Lett., **17**, 1209 (1966).
- [4] W.J. Brya. Sol. St. Commun., **12**, 253 (1973).
- [5] V. Srivastava, K. Joshi. Phys. Rev. B, **8**, 4671 (1973).
- [6] M.I. Alonso, K. Winer. Phys. Rev. B, **39**, 10 056 (1989).
- [7] H.D. Fuchs, G.H. Grein, M.I. Alonso, M. Cardona. Phys. Rev. B, **44**, 13 120 (1991).
- [8] P.M. Mooney, F. Dacol, J.C. Tsang, J.O. Chu. Appl. Phys. Lett., **62**, 2069 (1993).
- [9] J.C. Tsang, P.M. Mooney, F. Dacol, J.O. Chu. J. Appl. Phys., **75**, 8098 (1994).
- [10] P.H. Tan, K. Brunner, D. Bougeard, G. Abstreiter. Phys. Rev. B, **68**, 125 302-(1-6) (2003).
- [11] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. Thin Sol. Films, **466**, 69 (2004).
- [12] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. J. Appl. Phys., **96**, 7665 (2004).
- [13] A.V. Kolobov. J. Appl. Phys., **87**, 2926 (2000).
- [14] A. Ourmazd, J.C. Bean. Phys. Rev. Lett., **55**, 765 (1985).

- [15] D.J. Lockwood, K. Rajan, E.W. Fenton, J.-M. Baribeau, M.W. Denhoff. Sol. St. Commun., **61**, 465 (1987).
- [16] М.М. Волькенштейн. ДАН СССР, **32**, 185 (1941).
- [17] G. Nelin, G. Nilsson. Phys. Rev. B, **5**, 3151 (1972).
- [18] В.А. Володин, М.Д. Ефремов, А.И. Никифоров, Д.А. Орехов, О.П. Пчеляков, В.В. Улянов. ФТП, **37**, 1220 (2003).
- [19] В.А. Сачков, В.В. Болотов, В.А. Володин, М.Д. Ефремов. Препринт ИМСЭ СО РАН 2000-01.
- [20] J. Groenen, R. Carles, S. Christiansen, M. Albrecht, W. Dorsch, H.P. Strunk, H. Wawra, G. Wagner. Appl. Phys. Lett., **71**, 3856 (1997).
- [21] Z. Sui, H.H. Burke, I.P. Herman. Phys. Rev. B, **48**, 2162 (1993).
- [22] Д.А. Орехов, В.А. Володин, М.Д. Ефремов, А.И. Никифоров, В.В. Улянов, О.П. Пчеляков. Письма ЖЭТФ, **81**, 415 (2005).

*Редактор Л.В. Беляков*

### **Definition of composition and mechanical strain in $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$ heterostructures from Raman data: specification of parameters of the model**

*V.A. Volodin, M.D. Efremov, A.S. Deryabin, L.V. Sokolov*

Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch,  
Russian Academy of Sciences,  
630090 Novosibirsk, Russia

**Abstract** Raman spectroscopy technique was used for control of composition and strain in films of solid alloys  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$  with  $0.17 \leq x \leq 1.0$ . The composition and strain in the films were also measured using X-ray diffraction data. In the Raman spectra not only the peak position, but also peak intensities were analyzed for vibrations of Ge–Ge, Ge–Si and Si–Si bonds. It allows us to define more accurate some parameters of model for calculation of composition and strain in  $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}/\text{Si}(100)$  heterostructures from Raman spectroscopy data.