

PACS number (s): 73.20. - r

О.О. Даньків, Р.М. Пелешак, Б.М. Пелешак
Дрогобицький державний педагогічний університет
імені Івана Франка

ФОРМУВАННЯ ПОТЕНЦІАЛЬНОГО ПРОФІЛЮ В МАТРИЦІ GaAs З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ InAs

© Даньків О.О., Пелешак Р.М., Пелешак Б.М., 2003

O.O.Dan'kiv, R.M.Peleshchak, B.M.Peleshchak

FORMATION OF A POTENTIAL STRUCTURE IN A MATRIX GaAs WITH QUANTUM POINTS InAs

© Dan'kiv O.O., Peleshchak R.M., Peleshchak B.M., 2003

Побудована модель когерентно-напруженої квантової точки. Розраховано вплив неоднорідної деформації, яка є на межі розділення квантової точки і гетероепітаксійного шару, та розмірів КТ на глибину і профіль потенціальної ями для електронів і дірок у гетеросистемі з квантовими точками.

The model of a coherent-strained quantum point is constructed. Influence of non-uniform deformation, which is on border of the unit of a quantum point and heteroepitaxial layer, and the sizes of a quantum point on depth and a structure of a potential hole for electrons and holes at heterostructure with quantum points, is designed.

Вступ. В останні роки великий інтерес становлять дослідження квантово-розмірних структур, а, зокрема, нового класу твердотільних нанооб'єктів – квантових точок (КТ), в яких здійснюється просторове обмеження носіїв заряду у всіх трьох напрямках [1, 2, 3]. Останні досягнення методу субмоношарової міграційно-стимульованої епітаксії дозволяють вирощувати як окремі КТ, так і цілі масиви когерентно-напружених КТ, на основі яких створюються сучасні оптоелектронні прилади (лазери, світлодіоди) [4, 5]. Побудова лазерів на основі масивів КТ дозволяє вдосконалювати їхні технічні характеристики [6], а також дає можливість змістити довжину хвилі генерації в довгохвильову область, що важливо в сенсі практичного застосування.

Процес формування КТ на сингулярних і віцінальних поверхнях методом молекулярно-променевої епітаксії у системі InAs/GaAs або $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ здійснюється у два етапи [7]. На першому етапі відбувається ріст псевдоморфного напруженого шару InAs. При досягненні ним критичної товщини 1,5-1,7 моношару (МШ) настає другий етап – спонтанний розпад псевдоморфного шару на систему кристалічних острівців (КТ) і змочуючий шар InAs товщиною ~ 1 МШ відповідно до механізму Странського-Крастанова [8]. Такий розпад зумовлений релаксацією пружних напружень, що виникають у гетероепітаксійній системі за неузгодженості параметрів ґраток, і різними коефіцієнтами термічного розширення підкладки GaAs і епітаксійного шару InAs та виграшем вільної енергії системи. Найбільший виграш досягається при певній формі (пірамідальній [3]) і розмірах виникаючих тривимірних острівців (КТ). У реальних системах розміри і форма окремих КТ відхиляються від рівноважних за рахунок неоднорідних деформацій, які виникають у гетеросистемі.

Електронна структура квантової точки являє собою набір дискретних рівнів розмірного квантування і в цьому змісті подібна до електронної структури одиничного атома. Отже, КТ можна розглядати як штучно-створювані гігантські атоми з контрольовано-змінюваними параметрами, такими як глибина і характер квантуючого потенціалу, розмір і форма КТ, які визначаються технологією отримання.

Глибина і характер квантуючого потенціалу визначається профілем дна зони провідності і вершини валентної зони гетероструктури. Цей профіль розглядається як потенціальна енергія, яка визначає енергетичний спектр і квантові стани електрона.

У випадку КТ стрибок дна зони провідності на гетерограниці, зумовлений відмінністю у ширині заборонених зон матеріалів КТ і матриці, формує профіль квантуючого потенціалу, який має характер тривимірної потенціальної ями. У роботі [9] профіль тривимірної потенціальної ями, створеної КТ, моделювався прямокутним. Глибина визначалася тільки за рахунок різних ширин заборонених зон матриці і КТ.

У випадку когерентно-напружених КТ за наявності в їх околі полів пружних неоднорідних напруг глибина і форма квантуючого потенціалу визначається також характером неоднорідної деформації матриці і КТ. Зокрема, у гетеросистемі InAs/GaAs (001) з масивом КТ (InAs) неузгодження параметрів кристалічних ґраток становить $f = 7\%$. Оскільки різниця параметрів ґраток InAs і GaAs велика, напруження, що виникають у гетеросистемі з КТ істотно впливають на структуру дозволених зон та на їх розрив. У роботі [6] оцінений вплив ізотропної пружної деформації на глибину прямокутної потенціальної ями КТ (InAs) сферичної симетрії у гетеросистемі InAs/GaAs.

При отриманні КТ в реальних гетероепітаксійних системах присутні ефекти анізотропії, завдяки яким рівноважна форма КТ буде відмінна від сферичної. Зокрема, наявність когерентно-напружених шарів з аксіальною симетрією призведе до утворення КТ у формі циліндрів.

У зв'язку з тим стає актуальною задача про вплив неоднорідної деформації, яка є на межі розділення квантової точки (КТ) і гетероепітаксійного шару та розмірів КТ на глибину і профіль потенціальної ями для електронів і дірок у гетеросистемі з квантовими точками.

1. Модель когерентно-напруженої КТ. Циліндрична КТ з радіусом основи R_0 і висотою H_0 зображається пружним дилатаційним мікровключенням, тобто пружний циліндр радіусом R_0 і висотою H_0 (штрихова лінія на рис.1,а) вставляємо у циліндричну порожнину, що є в матриці GaAs (пунктирна лінія на рис.1,а), об'єм якої менший за об'єм мікровключення на ΔV . Щоб вставити таке циліндричне мікровключення, необхідно його стиснути і розтягнути матрицю GaAs в радіальних напрямках.

Оскільки постійна ґратки матеріалу InAs більша, ніж матриці GaAs, то при гетероепітаксійному нарощуванні в межах псевдоморфного росту InAs на шар GaAs матеріал InAs зазнає деформації стиску, а GaAs – розтягу. У результаті була одержана циліндрична квантова точка з радіусом основи R'_0 та висотою H , зображена суцільною лінією на рис. 1,а.

2. Деформаційні ефекти в гетероструктурах з КТ циліндричної та сферичної симетрії. Для знаходження діагональних компонентів тензора деформації необхідно знайти явний вигляд описаних вище зміщень в матеріалах InAs та GaAs. З цією метою запишемо рівняння рівноваги [10, 11] на проміжках $0 \leq r \leq R_0$ і $R_0 \leq r \leq R_1$:

$$\vec{\nabla} \operatorname{div} \vec{u} = 0 \quad (1)$$

з такими граничними умовами для циліндричної КТ:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\left| \varepsilon_{zz}^{(2)} \right| - \left| \varepsilon_{zz}^{(1)} \right| \cdot [2(u_r^{(1)} - u_r^{(2)}) - R_0] + 2(u_r^{(2)} - u_r^{(1)}) \right]_{r=R_0} = f \cdot R_0 \quad (\text{різниця об'ємів} \\ \text{пружного дилатаційного мікрովключення та циліндричної порожнини, що є в} \\ \text{матриці GaAs, дорівнює } \Delta V) \\ \sigma_{rr}^{(1)}|_{r=R_0} = \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_0} \quad (\text{умова рівноваги на межі } r = R_0) \\ \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_l} = \sigma_{e\phi}(N) \quad (\text{умова рівноваги на межі } r = R_l) \end{array} \right. \quad (2)$$

де $\Delta V = \pi R_0^2 H_0 f$, $f = \frac{a_{InAs} - a_{GaAs}}{a_{InAs}}$ – параметр неузгодженості сталих ґраток матеріалу

квантової точки і підкладки; у $\sigma_{e\phi}$ закладена взаємодія окремо виділеної КТ зі всіма іншими квантовими точками в рамках моделі самоузгодженого пружного поля, R_l – ширина перехідної області + радіус КТ – відстань, на якій КТ відчуває вплив інших КТ в матриці кристала.

$$u_r^{(1)} = C_1 r + \frac{C_2}{r}, \quad 0 \leq r \leq R_0 \quad (3)$$

$$u_r^{(2)} = C_3 r + \frac{C_4}{r}, \quad R_0 \leq r \leq R_l \quad (4)$$

Прийнявши $C_2 = 0$ (оскільки в т.г. $r = 0$ переміщення повинно бути скінченним),

$$u_r^{(1)} = C_1 r, \quad 0 \leq r \leq R_0 \quad (3')$$

Поле переміщень визначає такі компоненти тензора деформації [12]:

$$\varepsilon_{rr}^{(1)} = C_1 \quad (5)$$

$$\varepsilon_{\phi\phi}^{(1)} = C_1 \quad (6)$$

$$\varepsilon_{zz}^{(1)} = -D_{001}^{(1)} \cdot C_1 \quad (7)$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)} = C_3 - \frac{C_4}{r^2} \quad (8)$$

$$\varepsilon_{\phi\phi}^{(2)} = C_3 + \frac{C_4}{r^2} \quad (9)$$

$$\varepsilon_{zz}^{(2)} = -D_{001}^{(2)} \cdot \left(C_3 - \frac{C_4}{r^2} \right) \quad (10)$$

Константа $D_{001}^{(i)}$ залежить від напрямку двохосного напруження та виражається через пружні

сталі відповідних матеріалів: $D_{001}^{(i)} = 2 \frac{C_{12}^{(i)}}{C_{11}^{(i)}}$, де $i = InAs, GaAs$.

Механічна напруга в середовищах InAs та GaAs, відповідно:

$$\sigma_{rr}^{(1)} = \frac{E_1}{(1+\nu_1)(1-2\nu_1)} [(1+\nu_1)\varepsilon_{rr}^{(1)} + \nu_1(\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(1)} + \varepsilon_{zz}^{(1)})] \quad (11)$$

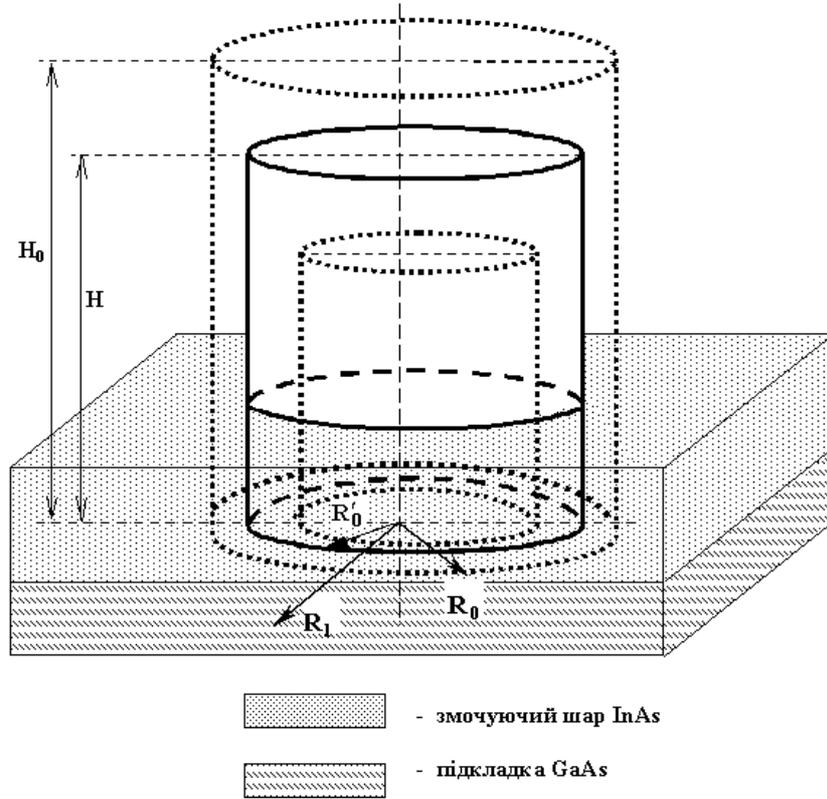


Рис. 1а. Циліндрична модель КТ

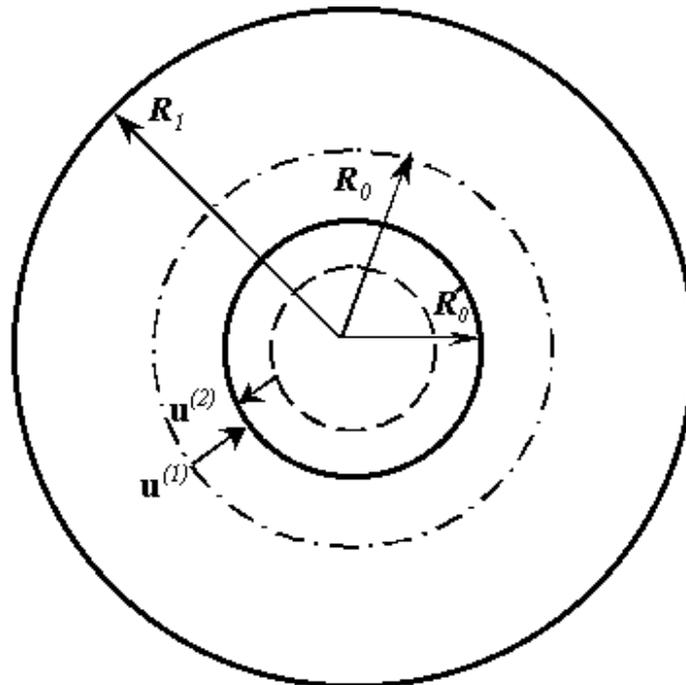


Рис. 1б. Сферична модель КТ

$$\sigma_{rr}^{(2)} = \frac{E_2}{(1+\nu_2)(1-2\nu_2)} [(1+\nu_2)\varepsilon_{rr}^{(2)} + \nu_2(\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(2)} + \varepsilon_{zz}^{(2)})] \quad (12)$$

де ν_1, ν_2, E_1, E_2 – коефіцієнти Пуассона та модулі Юнга для матеріалів InAs та GaAs, відповідно [13].

Розв'язавши систему рівнянь (2) із врахуванням (3)-(12), отримуємо невідомі коефіцієнти C_1, C_3, C_4 .

За допомогою аналогічних міркувань, які були зроблені для КТ циліндричної симетрії, було отримано діагональні компоненти тензора деформації для сферичної моделі квантової точки (рис. 1б).

Отримані компоненти тензора деформації дають змогу розрахувати вплив описаних деформаційних ефектів на зонну структуру гетеросистеми з КТ.

Внутрішню пружну деформацію можна розкласти на дві складові: ізотропну та одновісну. Ізотропна складова деформації (деформація всестороннього стиску) зсуває енергію зони провідності E_c та валентної зони E_v відносно їх рівноважних положень. Одновісна складова (деформація зсуву) розщеплює вироджену в Γ -точці валентну зону на підзони важких і легких дірок [14].

Отже, енергетичні зміщення країв дозволених зон під дією внутрішньої пружної деформації становлять:

- для циліндричної моделі квантової точки

$$\Delta E_c = a_c \varepsilon; \quad (13)$$

$$\Delta E_{hh} = \frac{\varepsilon}{C_{11}} [(-2a+b)C_{11} + 2(a+b)C_{12}]; \quad (14)$$

$$\Delta E_{lh} = \frac{-\varepsilon}{C_{11}} [(2a+b)C_{11} + 2(b-a)C_{12}]; \quad (15)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_{rr} + \varepsilon_{\varphi\varphi} + \varepsilon_{zz}; \quad [12, 14]$$

- для сферичної моделі квантової точки

$$\Delta E_c = a_c \varepsilon; \quad (16)$$

$$\Delta E_v = a_v \varepsilon; \quad (17)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_{rr} + \varepsilon_{\varphi\varphi} + \varepsilon_{\theta\theta}$$

де ΔE_c – зміщення дна зони провідності під дією деформації всестороннього стиску; $\Delta E_{hh}, \Delta E_{lh}$ – зміщення, відповідно, зони важких і легких дірок під дією ізотропної та одновісної складових внутрішньої деформації; ΔE_v – зміщення краю валентної зони під дією деформації всестороннього стиску; a_c, a_v – гідростатичний потенціал деформації зони провідності та валентної зони, відповідно; a – ізотропний деформаційний потенціал ($a = a_c - a_v$); b – одновісний деформаційний потенціал; C_{11}, C_{12} – компоненти тензора пружності матеріалів InAs та GaAs.

Обговорення числових результатів та висновки. На рис. 2 (циліндрична модель КТ) і рис. 4 (сферична модель КТ) графічно показані деформаційні ефекти у структурі InAs/GaAs при

$$a^{InAs} = 6,08 \text{ \AA}; a^{GaAs} = 5,65 \text{ \AA}; C_{11}^{InAs} = 0,833 \text{ Mbar}; C_{12}^{InAs} = 0,453 \text{ Mbar}; C_{11}^{GaAs} = 1,223 \text{ Mbar};$$

$$C_{12}^{GaAs} = 0,571 \text{ Mbar}; D_{001}^{InAs} = 1,088; D_{001}^{GaAs} = 0,934; \Delta E_c(0) = 0,6981 \text{ eV}; \Delta E_v(0) = 0,3759 \text{ eV};$$

$$a_c^{InAs} = -5,08 \text{ eV}; a_c^{GaAs} = -7,17 \text{ eV}; a_v^{InAs} = 1 \text{ eV};$$

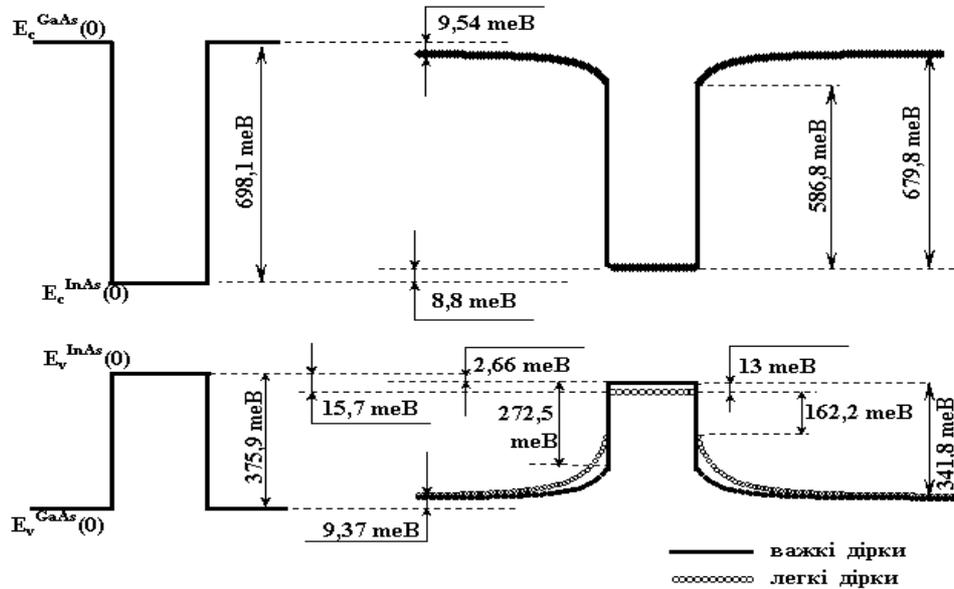


Рис. 2,а. Зонна структура потенціальної ями для електронів та дірок КТ InAs циліндричної симетрії у недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs

Рис. 2,б. Зонна структура потенціальної ями для електронів та дірок КТ InAs циліндричної симетрії у механічно-напруженій гетероструктурі InAs/GaAs при значеннях параметрів:

$$R_0 = 9 \text{ \AA}; R_1 = 100 \text{ \AA}; \sigma_{ef} = 10^8 \text{ H/m}^2$$

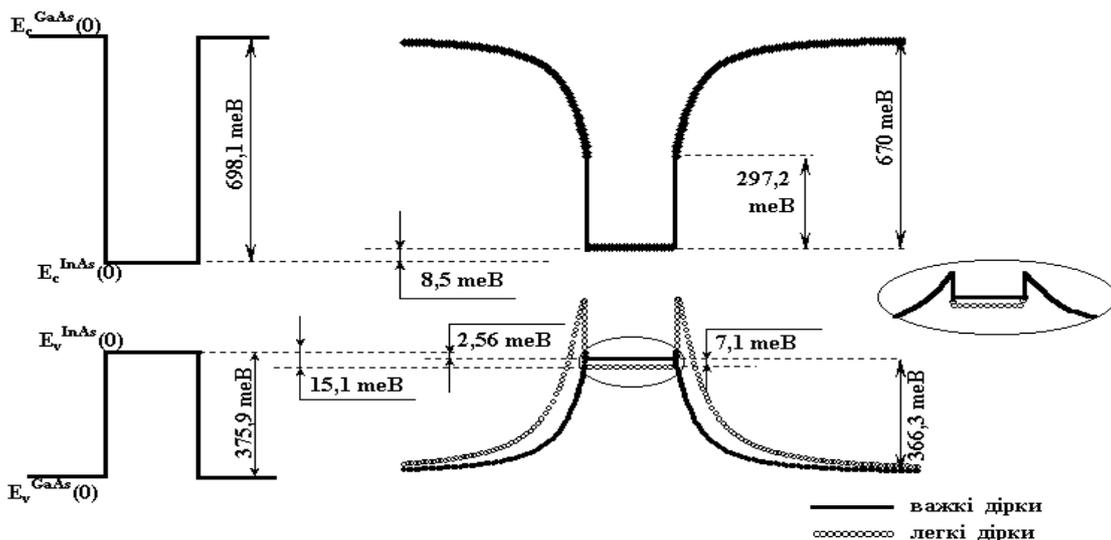


Рис. 3,а. Зонна структура потенціальної ями для електронів та дірок КТ InAs циліндричної симетрії у недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs

Рис. 3,б. Зонна структура потенціальної ями для електронів та дірок КТ InAs циліндричної симетрії у механічно-напруженій гетероструктурі InAs/GaAs при значеннях параметрів:

$$R_0 = 18 \text{ \AA}; R_1 = 100 \text{ \AA}; \sigma_{ef} = 10^8 \text{ H/m}^2$$

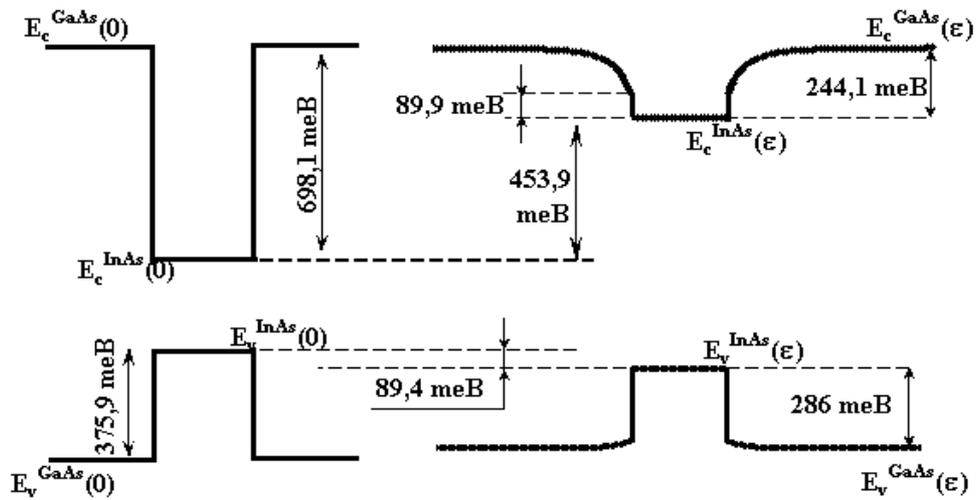


Рис. 4,а. Зонна структура потенціальної ями для електронів та дірок КТ InAs сферичної симетрії у недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs

Рис. 4,б. Зонна структура потенціальної ями для електронів та дірок КТ InAs сферичної симетрії у механічно-напруженій гетероструктурі InAs/GaAs при значеннях параметрів:

$$R_0 = 5 \text{ \AA}; \quad R_1 = 100 \text{ \AA}; \quad \sigma_{ef} = 10^8 \text{ H/m}^2$$

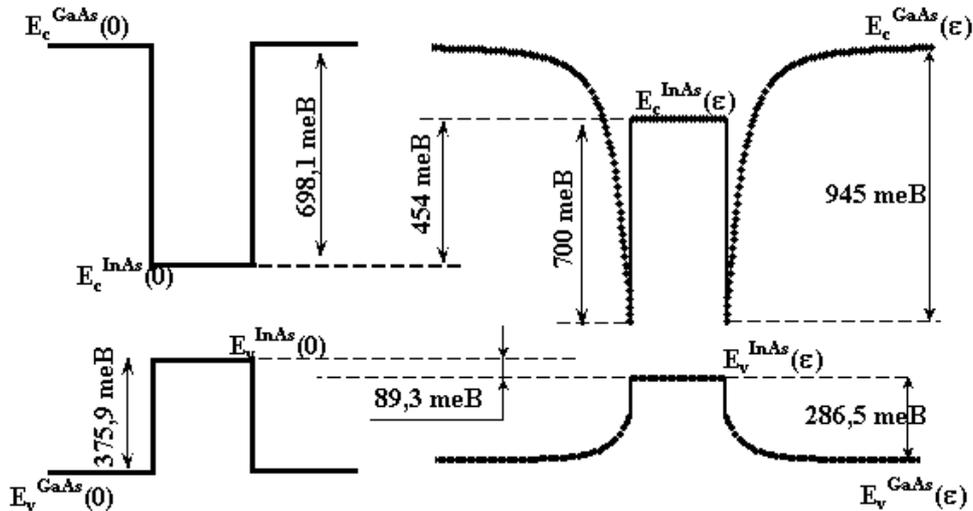


Рис. 5,а. Зонна структура потенціальної ями для електронів та дірок КТ InAs сферичної симетрії у недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs

Рис. 5,б. Зонна структура потенціальної ями для електронів та дірок КТ InAs сферичної симетрії у механічно-напруженій гетероструктурі InAs/GaAs при значеннях параметрів:

$$R_0 = 9 \text{ \AA}; \quad R_1 = 100 \text{ \AA}; \quad \sigma_{ef} = 10^8 \text{ H/m}^2$$

$$a_v^{GaAs} = 1,16\text{eV}; b^{InAs} = -1,8\text{eV}; b^{GaAs} = -1,76\text{eV}; [9]$$

$$E_g^{InAs} = 0,36\text{eV}; E_g^{GaAs} = 1,452\text{eV} [15, 16].$$

Як видно з рис. 2,б, стиск циліндричної квантової точки InAs з радіусом основи $R_0 = 9 \text{ \AA}$ в матриці GaAs зумовлює збільшення ширини забороненої зони матеріалу на 11,5 меВ. У матриці GaAs спостерігається пониження краю зони провідності на 9,54 меВ, а краї зон важких і легких дірок піднімаються, відповідно, на 9,37 і 18,4 меВ. Розрив зони провідності $\Delta E_c(0)$ зменшився на 0,11 еВ. Розрив зони важких дірок $\Delta E_{hh}(\varepsilon)$ дорівнює 0,273еВ, а $\Delta E_{lh}(\varepsilon) = 0,162$ еВ. Енергетична відстань між зоною важких та легких дірок становить 13 меВ.

На рис. 4,б показано вплив деформаційних ефектів на глибину і профіль потенціальної ями для сферичної моделі КТ. Числові розрахунки показують, що стиск сферичної квантової точки InAs радіусом $R_0 = 5 \text{ \AA}$ в матриці GaAs спричиняє збільшення ширини забороненої зони матеріалу на 0,54 еВ. У матриці GaAs спостерігається пониження краю зони провідності (на 8,3меВ) та підвищення краю валентної зони (на 1,3меВ). Розриви зони провідності $\Delta E_c(0)$ та валентної зони $\Delta E_v(0)$, відповідно, зменшилися на 0,608 еВ та 0,114 еВ.

Нетривіальні результати були отримані нами при дослідженні впливу зміни радіуса R_0 КТ на профіль потенціальної ями гетероструктури InAs/GaAs з масивом КТ InAs. При невеликих змінах R_0 (порядку 2-3 \AA) спостерігаються лише кількісні зміни наведених вище параметрів (розриву дозволених зон, ширини забороненої зони матеріалу КТ, енергетичного зміщення зон важких і легких дірок тощо). При збільшенні (зменшенні) R_0 в 2 рази змінюється якісно профіль потенціальних ям: спостерігаються дві квазітрикутні ями, розділені бар'єром, висота якого регулюється знову ж таки величиною R_0 радіуса квантової точки. Ширина бар'єру для циліндричної моделі КТ становить 36 \AA , для сферичної КТ – 10 \AA .

Як видно з рис. 3,б і 5,б, для циліндричної КТ, зокрема, при значенні $R_0=18 \text{ \AA}$ деформаційні ефекти (ізотропна та одновісна складові) істотно змінюють структуру зон важких та легких дірок. Для сферичної КТ спостерігається зміна характеру дна зони провідності при значенні $R_0=9 \text{ \AA}$.

Зміна профілю дна зони провідності і вершини валентної зони зумовлена дією двох конкуруючих факторів: із збільшенням радіуса R_0 квантової точки глибина потенціальної ями як електронів, так і дірок, зменшується. У той же ж час, збільшується кривизна країв дозволених зон у матриці, що призводить до зростання ефективної ширини потенціальних ям.

Результати розв'язку задачі, які наведені у цій роботі, дозволяють зробити такі висновки:

- збільшення радіуса R_0 циліндричної КТ від 9 до 11 \AA приводить до зменшення ширини забороненої зони матеріалу КТ (на 0,114меВ); зменшення глибини потенціальної ями електронів (на 1,64меВ), важких та легких дірок (на 1,62 та 3,11меВ, відповідно); зменшення розриву зони провідності (на 47,58меВ) та розриву зон важких і легких дірок (на 46,74 та 91,89меВ, відповідно); збільшення кривизни країв дозволених зон у матриці GaAs; зменшення енергетичної відстані між зонами важких та легких дірок (на 0,06меВ);

- збільшення радіуса R_0 сферичної КТ від 9 до 11 \AA приводить до зменшення ширини забороненої зони матеріалу КТ (на 0,3меВ); збільшення глибини потенціальної ями електронів та дірок (на 788 та 0,1меВ, відповідно); збільшення величини розриву зони провідності (на 788меВ) та зменшення розриву валентної зони (на 133меВ);

- у випадку $R_1 \rightarrow \infty$ для циліндричної моделі КТ спостерігаємо збільшення ширини забороненої зони матеріалу InAs (на 7,01meV); збільшення глибини потенціальних ям електронів (на 0,99meV), важких і легких дірок (на 26,77 та 2,79meV, відповідно); збільшення енергетичної відстані між зонами важких та легких дірок (на 8,04meV); збільшення величини розриву дозволених зон (зони провідності – на 5,12meV, зони важких дірок – на 8,74meV, зони легких дірок – на 10,7meV). Причому краї дозволених зон в матриці GaAs прямують до відповідних рівнів дозволених зон недеформованої структури InAs/GaAs;

- у випадку $R_1 \rightarrow \infty$ для сферичної моделі КТ спостерігаємо збільшення ширини забороненої зони матеріалу InAs (на 10meV); збільшення глибини потенціальної ями електронів (на 795meV) та зменшення глибини потенціальної ями дірок (на 3,2meV); збільшення величини розриву зони провідності (на 800meV) та зменшення розриву валентної зони (на 2,7meV);

- при зменшенні на порядок σ_{ef} (від 10^8 до 10^7 Н/м²) для циліндричної КТ спостерігаємо збільшення ширини забороненої зони матеріалу КТ (на 6,19meV), збільшення глибини потенціальних ям електронів, важких та легких дірок (на 0,87meV, 4,15meV та 2,47meV, відповідно); зменшення кривизни країв дозволених зон в матриці GaAs; збільшення величини розриву зони провідності (на 4,51meV) та розривів зон важких та легких дірок (на 7,69 та 9,43meV, відповідно); збільшення енергетичної відстані між зонами важких та легких дірок (на 7,10meV);

- при зменшенні на порядок σ_{ef} (від 10^8 до 10^7 Н/м²) для сферичної КТ спостерігаємо збільшення ширини забороненої зони матеріалу КТ (на 8,53meV); зменшення глибини потенціальних ям електронів та дірок (на 1,87 та 2,75meV, відповідно); збільшення величини розриву зони провідності (на 13,59meV) та зменшення розриву валентної зони (на 2,45meV).

1. Леденцов Н.Н., Устинов В.М. // ФТП. – 1998. – 32, В.4. – С.385-410.
2. Цацульников А.Ф., Егоров А.Ю. // ФТП. – 1997. – 31, В.7. – С.851-854.
3. Shchukin V. A. et al. *Phys.Rev.Lett.* 75 2968 (1995).
4. Цацульников А.Ф., Воловик Б.В. // ФТП. – 2000. – 34, В.3. – С.330-333.
5. Малеев Н.А., Жуков А.Е. // ФТП. – 2000. – 34, В.5. – С.612-615.
6. Евтихьев В.П., Константинов О.В., Матвеевцев А.В., Романов А.Е. // ФТП. – 2002. – 36, В.1. – С.79-85.
7. Талалаев В.Г., Новиков Б.В. // ФТП. – 2000. – 34, В.4. – С.467-475.
8. Tishchenko V.V., Raptis Y.S., Anastassakis E., Bondar N.V. // *Solid. State Communs.* – 1995. – 96, №10. – P.793-798.
9. Авруцкий И.А., Сычугов В.А. // ФТП. – 1991. – 25, В.10. – С.1787-1791
10. Эшелби Дж. *Континуальная теория дислокаций.* – М., 1963.
11. Теодосиу. *Упругие модели дефектов в кристаллах.* – М., 1985.
12. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теория упругости.* – М., 1965.
13. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. // ФТП. – 2002. – 44, В.12. – С.2158-2163.
14. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках.* – М., 1972.
15. Qteish A. and Needs R.J. // *Physical Review B.* – 1992. – 45, №3. – P.1317-1326.
16. Chris G. Van de Walle // *Physical Review B.* – 1989. – 39, №3. – P.1871-1883.