

НЕОДНОРОДНЫЕ ДЕФОРМАЦИИ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Н. А. Гиппиус*, С. Г. Тиходеев†

*Институт общей физики Российской академии наук
117942, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 29 декабря 1998 г.

Развит метод численного расчета неоднородных деформаций в напряженных полупроводниковых наноструктурах, например в квантовых нитях и точках, полученных путем нанолитографии из напряженных квантовых ям InGaAs/GaAs. Метод основан на решении линейной задачи теории упругости методом функций Грина и предполагает отсутствие дефектов и дислокаций на гетеропереходах наноструктуры. Рассчитаны пространственные распределения компонент тензора деформации и обусловленные неоднородной деформацией сдвиги электронных и дырочных потенциалов в наноструктуре.

1. ВВЕДЕНИЕ

В открытых наноструктурах типа квантовых нитей или точек, нанолитографированных на поверхности образца с приповерхностной квантовой ямой InGaAs/GaAs, напряженные слои InGaAs вызывают сильную неоднородную деформацию, зависящую от формы наноструктуры. Частичная упругая релаксация напряженных слоев сильно влияет на энергетические спектры и волновые функции электронов и дырок в наноструктуре, открывая тем самым широкие возможности для зонной инженерии и для управления волновыми функциями носителей [1–3]. В настоящей работе развит метод расчета неоднородных деформационных полей в напряженных наноструктурах и рассчитаны распределения деформации и вызванные ими неоднородные сдвиги энергий электронов и дырок в квантовых нитях InGaAs/GaAs и цилиндрических квантовых точках.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В дальнейшем будем предполагать, что в рассматриваемой системе отсутствуют дислокации и что теория упругости применима вплоть до нанометрового масштаба. Мы предлагаем весьма эффективный подход для определения деформаций, использующий функции Грина теории упругости [4]. В рамках этого метода явно учитывается кусочно-постоянный характер изменения упругих свойств полупроводниковых наноструктур, состоящих, как правило, из однородных эпитаксиально сочлененных друг с другом фрагментов, сделанных, однако, из различных полупроводников. Мы покажем,

*E-mail: gippius@wpax13.physik.uni-wuerzburg.de

†E-mail: tikh@gpi.ru

что тензор деформаций внутри области постоянства упругих свойств может быть представлен в виде функционала сил, приложенных к границе этой области, что позволяет свести объемную задачу упругости к решению интегрального уравнения на поверхностях соприкосновения различных фрагментов полупроводниковой наноструктуры.

Будем моделировать упругие свойства фрагментов в приближении изотропной упругой среды, для которого функции Грина выписываются явно [4]. К счастью, представляющие интерес наноструктуры на основе полупроводников $A^{III}B^V$, например на основе гетероструктур InGaAs/GaAs, неизотропны только слабо. Например, упругие модули C_{12} и C_{44} в GaAs (и в InGaAs) мало отличаются друг от друга:

$$\frac{C_{12} - C_{44}}{C_{12}} \approx 0.057 \ll 1.$$

В приближении изотропной среды задача теории упругости полностью описывается двумя константами: модулем Юнга E и коэффициентом Пуассона σ . В действительности нам нужны только относительные значения модулей Юнга.

Источником напряжения в наноструктуре является различие постоянных решетки в GaAs и InGaAs. В расчетах мы используем следующие низкотемпературные зависимости постоянных решетки (в нм) [5]:

$$a_{\text{GaAs}}(T(\text{K})) = 0.565325 + 6.86 \cdot 10^{-6}T, \quad a_{\text{InAs}}(T(\text{K})) = 0.60583 + 4.52 \cdot 10^{-6}T,$$

и линейную интерполяцию для InGaAs.

Например, в случае двумерной бесконечной квантовой ямы $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ на подложке GaAs разница постоянных решетки приводит к следующей однородной одноосной деформации ямного слоя InGaAs (при условии эпитаксиальных атомарно-совпадающих интерфейсов):

$$\begin{aligned} u_{xx}^{(0)} = u_{yy}^{(0)} &= \frac{a_{\text{GaAs}} - a_{\text{InGaAs}}}{a_{\text{InGaAs}}} \equiv -\delta, \\ u_{zz}^{(0)} &= -\frac{2\sigma}{1-\sigma} u_{xx}^{(0)} = \frac{2\sigma}{1-\sigma} \delta, \\ u_{xy}^{(0)} = u_{yz}^{(0)} = u_{zx}^{(0)} &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Барьерные слои GaAs не деформированы. При конечных размерах фрагментов наступает частичная релаксация сжатия фрагментов InGaAs, деформация становится неоднородной и захватывает фрагменты GaAs.

Рассмотрим простейшую ситуацию бездислокационного сочленения двух фрагментов полупроводниковой наноструктуры, V_1 и V_2 , вдоль некоторой поверхности S_{12} . В случае различия равновесных постоянных решетки a_1 и a_2 оба фрагмента окажутся деформированными из-за взаимного поверхностного воздействия. Обозначим поверхностную силу, действующую на первый фрагмент со стороны второго, через $\mathbf{g}_{12} \equiv \mathbf{g}$. По третьему закону Ньютона $\mathbf{g}_{21} = -\mathbf{g}_{12} \equiv -\mathbf{g}$.

В общем случае деформации приводят также к сдвигам и поворотам фрагментов как целых. Для каждого фрагмента произвольное, малое по сравнению с его размером, смещение, вызванное деформациями, можно записать в виде

$$\mathbf{u}(P) = \mathbf{u}_0(P) + \mathbf{t}_{cm} + [\mathbf{\Omega}(\mathbf{r}_P - \mathbf{r}_{cm})] + \mathbf{u}^d(P), \quad (2)$$

где $u_0(P)$ — исходное равновесное смещение ячеек недеформированного фрагмента, t_{cm} и Ω — сдвиг и поворот фрагмента как целого, r_{cm} — координата центра масс фрагмента, $u^d(P)$ — чисто деформационное смещение, являющееся линейным функционалом поверхностных сил g :

$$u_i^d(P) = \int_S U_{ij}^g(P, P') g_j(P') dS_{P'} . \tag{3}$$

В дальнейшем мы покажем, как можно вычислить $U_{ij}^g(P, P')$ — ядро функционала, определяющего деформационные смещения однородного фрагмента по силам, приложенным к его поверхности S .

Условие бездефектного сочленения фрагментов в каждой точке вдоль поверхности S_{12} можно записать в виде

$$u^{(1)}(P) = u^{(2)}(P), \tag{4}$$

где

$$u^{(1)}(P) \equiv u_0^{(1)}(P) + t_{cm}^{(1)} + [\Omega^{(1)}(r_P - r_{cm}^{(1)})] + \int_S U^{g^{(1)}}(P, P') g(P') dS_{P'} ,$$

$$u^{(2)}(P) \equiv u_0^{(2)}(P) + t_{cm}^{(2)} + [\Omega^{(2)}(r_P - r_{cm}^{(2)})] - \int_S U^{g^{(2)}}(P, P') g(P') dS_{P'} .$$

Напомним, что разные знаки перед интегралами связаны с определением $g_{12} \equiv g$ и $g_{21} = -g_{12} \equiv -g$.

При стационарной деформации суммарная поверхностная сила и суммарный момент сил для каждого фрагмента должны равняться нулю:

$$\int_S g_i(P') dS_{P'} = 0, \quad \int_S \varepsilon_{ij\gamma} r_j(P') g_\gamma(P') dS_{P'} = 0 . \tag{5}$$

Для численных расчетов удобно перейти от интегралов к суммам по малым поверхностным элементам.

Без ограничения общности можно зафиксировать один из фрагментов, скажем первый, положив $t_{cm}^{(1)} = 0$ и $\Omega^{(1)} = 0$. Пусть поверхность S_{12} разбита на N_S элементов, тогда (4) и (5) дают $3N_S + 6$ уравнений для определения сил $g(P')$ ($3N_S$ неизвестных), $t_{cm}^{(2)}$ и $\Omega^{(2)}$ (еще шесть неизвестных). Разрешив эту систему, можно определить поверхностные силы $g(P')$, а зная их и $U_{ij}^{g^{(n)}}(P, P')$, $n = 1, 2$ для произвольных точек фрагментов P и P' , лежащих на S_{12} , можно найти смещения в произвольной точке тела.

Опишем теперь метод построения $U_{ij}^g(P, P')$. Заполним все пространство, внешнее по отношению к рассматриваемому фрагменту, тем же веществом и приложим к получившейся однородной упругой среде некоторые силы $f(P')$ в точках P' , лежащих на S . Вызванные этими силами смещения могут быть найдены по известным [4] выражениям для функций Грина однородной бесконечной упругой среды:

$$u_i(P) = \int_S A_{ij}(P, P') f_j(P') dS_{P'} , \tag{6}$$

$$A_{ij}(P, P') \equiv A_{ij}(R = r_P - r_{P'}) = \frac{1}{8\pi E} \frac{1 + \sigma}{1 - \sigma} \frac{(3 - 4\sigma)\delta_{ij} R^2 + R_i R_j}{R^3} ,$$

где E — модуль Юнга, σ — коэффициент Пуассона. Тензор деформаций

$$u_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right)$$

и тензор напряжений

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{1 + \sigma} \left(u_{ij} + \frac{\sigma}{1 - 2\sigma} u_{ll} \delta_{ij} \right),$$

очевидно, также являются известными функционалами $\mathbf{f}(P')$.

Силы, действующие на ограниченный поверхностью S фрагмент бесконечной упругой среды в точке P' , равны, по определению,

$$g_i^{(in)}(P') = \sigma_{ij}(P) n_j(P'), \quad P \rightarrow P', \quad (7)$$

где $n_j(P')$ — компоненты вектора нормали к поверхности S в точке P' , а точка P принадлежит внутреннему фрагменту. Вслед за u_{ij} и σ_{ij} распределение сил $g^{(in)}$ становится также некоторым известным функционалом $\mathbf{f}(P')$:

$$g_i^{(in)}(P') = \int_S B_{ij}(P', P'') f_j(P'') dS_{P''}. \quad (8)$$

Подчеркнем, что силы $g^{(in)}(P')$ отличаются от $\mathbf{f}(P')$, в чем легко убедиться, рассмотрим частный случай, когда приложенные силы \mathbf{f} отличны от нуля лишь в нескольких точках поверхности S . Однако вызванные этими силами деформации и, следовательно, $g^{(in)}$ отличны от нуля, вообще говоря, вдоль всей поверхности.

Поскольку упругое взаимодействие является близкодействующим, деформация внутреннего фрагмента бесконечной упругой среды, вызванная силами $\mathbf{f}(P')$, очевидно, совпадает с деформацией свободного тела той же формы и с теми же упругими свойствами, к поверхности которого приложены силы $g^{(in)}$.

Таким образом, задача о деформации свободного тела, к поверхности которого приложены силы $g(P')$, может быть решена в два этапа. Сначала находим распределение сил $\mathbf{f}(P')$, удовлетворяющее уравнению

$$\int_S B_{ij}(P', P'') f_j(P'') dS_{P''} = g_i(P'), \quad (9)$$

а затем по известным формулам (6) находим деформацию внутреннего фрагмента упругой среды, по построению совпадающую с искомой деформацией свободного тела.

Поскольку нас интересуют стационарные деформации, распределения сил \mathbf{f} и \mathbf{g} должны обладать нулевыми равнодействующими и суммарными моментами. Поэтому в дополнение к (5) должно выполняться аналогичное условие для \mathbf{f} ,

$$\int_S f_i(P') dS_{P'} = 0, \quad \int_S \varepsilon_{ijk} (r_j(P') - r_j^c) f_k(P') dS_{P'} = 0. \quad (10)$$

Уравнения (5), (10) можно рассматривать как скалярные произведения векторов в конфигурационном пространстве распределений поверхностных сил:

$$(\mathbf{g}\mathbf{F}^{(i)}) = 0, \quad (\mathbf{g}\mathbf{M}^{(i)}) = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (11)$$

где векторы $\mathbf{F}^{(i)}$, $\mathbf{M}^{(i)}$ имеют компоненты $F_j^{(i)}(P') = \delta_{ij}$, $M_k^{(i)}(P') = \varepsilon_{ijk}(r_j(P') - r_j^{cm})$, а скалярное произведение распределений векторов \mathbf{a} и \mathbf{b} определено как

$$(\mathbf{a}\mathbf{b}) = \int_S a_k(P')b_k(P')dS_{P'}. \quad (12)$$

Эти условия означают, что из всего конфигурационного пространства распределений поверхностных сил физический интерес представляет только подпространство, ортогональное гиперплоскости FM , натянутой на векторы $\mathbf{F}^{(i)}$, $\mathbf{M}^{(i)}$, $i = 1, 2, 3$.

Отметим, что для произвольного распределения \mathbf{f} , даже имеющего ненулевые равнодействующие и суммарные моменты, соответствующие распределения \mathbf{g} должны быть ортогональны гиперплоскости FM , поскольку по построению они представляют собой силы, действующие на покоящийся фрагмент. Это означает, что оператор $B_{ij}(P', P'')$ из (8) сжимает все конфигурационное пространство до ортогонального дополнения гиперплоскости FM и, следовательно, является вырожденным. Непосредственное обращение матрицы $B_{ij}(P', P'')$ поэтому невозможно.

Однако эта трудность может быть легко устранена, если в (8) заменить B на эквивалентный ему на подпространстве нулевых равнодействующих и суммарных моментов оператор

$$B_0 = \Pi_{FM} + (1 - \Pi_{FM})B(1 - \Pi_{FM}), \quad (13)$$

где Π_{FM} — проектор на гиперплоскость FM . Оператор B_0 уже не является вырожденным. При переходе от интегралов по поверхности к суммам по N_S малым площадкам B_0 становится невырожденной матрицей $N_S \times N_S$, которая может быть обращена стандартными методами. Полученная таким способом матрица позволяет записать решение (8) в виде $\mathbf{f} = B_0^{-1} \mathbf{g}$. Подставляя это выражение для \mathbf{f} в $\mathbf{u} = A\mathbf{f}$ из (6), приходим к искомой связи между полем деформации упругого тела (\mathbf{u}) и силами, приложенными к его поверхности (\mathbf{g}):

$$\mathbf{u} = A\mathbf{f} = A B_0^{-1} \mathbf{g}. \quad (14)$$

Сравнивая это выражение с (3), получаем окончательное выражение для $U_{ij}^g(P, P')$:

$$U_{ij}^g(P, P') = \sum_{k, P''} A_{ik}(P, P'') (B_0^{-1})_{kj}(P'', P'). \quad (15)$$

В начале этого раздела мы рассмотрели случай соприкосновения двух фрагментов. Этот же подход может быть легко обобщен на произвольную структуру, состоящую из N_r фрагментов, сочлененных вдоль N_s поверхностей.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ СТРУКТУР InGaAs/GaAs И ОБСУЖДЕНИЕ

Проиллюстрируем теперь возможности данного подхода на примере расчета деформаций в конкретных полупроводниковых структурах — квантовых нитях и цилиндрических квантовых точках. Поперечное сечение этих структур показано на рис. 1. В квантовых нитях компоненты тензора деформации не зависят от координаты вдоль оси, а в

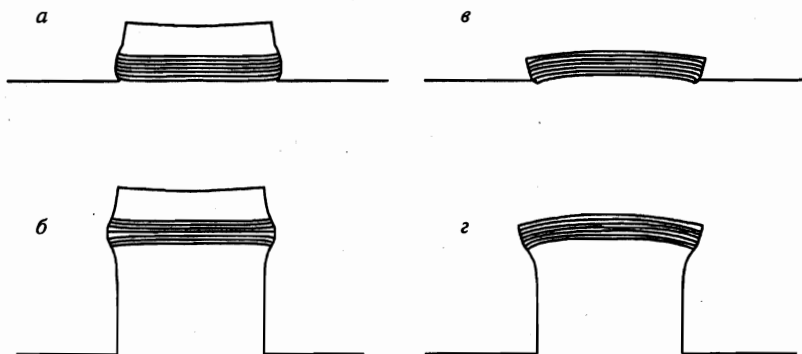


Рис. 1. Поперечное сечение квантовых нитей InGaAs/GaAs ширины $L_x = 45$ нм, рассчитанное для четырех различных сочетаний толщины L_{cap} верхнего барьерного слоя, толщины L_z ямного слоя и глубины L_b травления нижнего барьерного слоя; L_{cap} , L_z и L_b равны соответственно 10, 5 и 0 нм (а); 10, 5 и 35 нм (б); 0, 5 и 0 нм (в); 0, 5 и 35 нм (г). В целях визуализации компоненты тензора деформации увеличены в 200 раз

цилиндрических квантовых точках, соответственно, нет зависимости от азимутального угла. В этих условиях формулы, приведенные в предыдущем разделе для произвольной геометрии, могут быть еще более упрощены. Получающиеся интегральные уравнения становятся при этом одномерными и могут быть легко решены численно.

На рис. 1 проиллюстрированы результаты наших вычислений для поперечного сечения квантовых нитей на основе приповерхностных квантовых ям $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}/\text{GaAs}$. С целью визуализации получающейся деформации структур рассчитанные деформационные смещения увеличены в 200 раз. Значения использованных упругих параметров (коэффициента Пуассона σ и относительного изменения модуля Юнга E) см. в таблице. В приведенных примерах взяты различные сочетания толщины L_{cap} верхнего барьерного слоя GaAs, толщины L_z квантовой ямы InGaAs и глубины L_b травления GaAs под квантовой ямой для одинаковых горизонтальных ширин $L_x = 45$ нм. Видно, что релаксация напряжения в слоях InGaAs максимальна вблизи вертикальных стенок структуры. Кроме того, уменьшение толщины верхнего барьерного слоя приводит к изгибу слоя квантовой ямы как целого (см. рис. 1в и г). Как видно, верхний слой GaAs приводит к существенному дополнительному сжатию ямного слоя InGaAs. Как мы увидим ниже, это обстоятельство может привести к весьма резким изменениям зонных параметров рассматриваемых структур. Решения для квантовых точек аналогичного сечения подобны решениям для нитей с той только разницей, что амплитуда релаксации слоя InGaAs в квантовой точке больше, чем в квантовой нити. Этого и следует ожидать ввиду большей «открытости» квантовых точек.

Сдвиг ширины запрещенной зоны полупроводника,

$$\Delta_g = \Delta_c - \Delta_v, \quad (16)$$

может быть вычислен через компоненты тензора деформации. Здесь сдвиги дна зоны проводимости и верха валентной зоны соответственно равны

$$\Delta_c = a_c \epsilon, \quad (17)$$

$$\Delta_v = a_v \epsilon + \sqrt{\frac{b_v^2}{2} \epsilon_1^2 + d_v^2 \epsilon_2^2}, \quad (18)$$

Материальные параметры GaAs и $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ при низких температурах, использованные при вычислениях

	GaAs	$\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$
σ	0.31	0.31
E , отн. ед.	1	0.95
a , нм	0.56534	0.56939
$-\delta \cdot 10^3$	0	7.11295
a_c , эВ	-7.2	-7.0
a_v , эВ	1.2	1.2
d_v , эВ	1.9	1.8
b_v , эВ	4.5	4.4

где

$$\epsilon = \text{Tr } u_{ij},$$

$$\epsilon_1^2 = (u_{xx} - u_{yy})^2 + (u_{yy} - u_{zz})^2 + (u_{zz} - u_{xx})^2,$$

$$\epsilon_2^2 = u_{xy}^2 + u_{yz}^2 + u_{zx}^2.$$

Деформационные константы a_c, a_v, b_v, d_v [5] приведены в таблице.

На рис. 2 показаны рассчитанные зависимости перенормировки ширины запрещенной зоны Δ_g в Γ -точке в центре ямного слоя InGaAs от поперечного размера наноструктуры (соответственно от ширины L_x квантовой нити и диаметра D цилиндрической точки). Для каждой системы мы приводим зависимости перенормировки ширины зоны для четырех различных вариантов поперечного сечения наноструктуры, показанных на рис. 1.

Значение $\Delta_g = 0$ на рис. 2 отвечает полной упругой релаксации слоя InGaAs . Значение

$$\Delta_g^{(0)} = (a_c - a_v)\text{Tr } u^{(0)} - |b_v(u_{xx}^{(0)} - u_{zz}^{(0)})| \quad (19)$$

(см. также (2)), равное примерно 40 мэВ в структурах $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}/\text{GaAs}$ при $T = 2$ К и показанное на рис. 2 горизонтальной штриховой прямой, отвечает полной одноосной деформации напряженной квантовой ямы $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ на бесконечной подложке GaAs. Чем ближе рассчитанное изменение ширины зоны на рис. 2 к нулевому значению, тем больше упругая релаксация слоя InGaAs , и, наоборот, чем оно ближе к $\Delta_g^{(0)}$, тем сильнее упругое напряжение слоя InGaAs .

Следует особо подчеркнуть различие полученных зависимостей для структур, имеющих и не имеющих дополнительный барьерный слой GaAs поверх ямного слоя InGaAs (соответственно квадраты и треугольники на рис. 2). Это различие сильно нарастает при $L_x, D < 100$ нм и достигает значений в 15–20 мэВ. Оно связано с более сильной упругой релаксацией в структурах без прикрывающего слоя GaAs за счет возможности

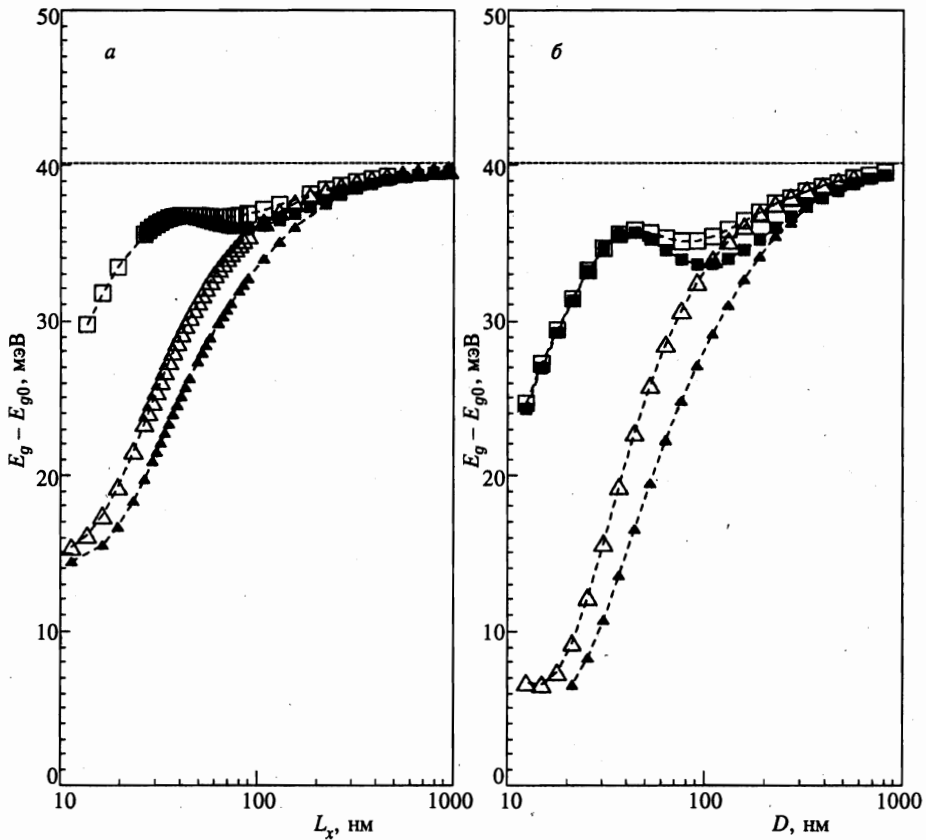


Рис. 2. Изменение ширины запрещенной зоны в центре ямного слоя в напряженных квантовых нитях (а) и точках (б) на основе $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}/\text{GaAs}$ как функция поперечного размера наноструктуры, рассчитанное для четырех различных поперечных сечений на рис. 1 (□ отвечают структуре на рис. 1а, ■ — рис. 1б; △ — рис. 1в, ▲ — рис. 1г)

более сильного изгиба, хорошо видно на рис. 1. Как и ожидалось, амплитуда обусловленных частичной упругой релаксацией сдвигов зон в квантовых точках значительно сильнее, чем в квантовых нитях.

Сравнение приведенных расчетов с экспериментальными данными [6] по исследованию спектров фотолюминесценции в литографированных квантовых нитях и квантовых точках (на основе $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$) показывает, что наблюдаемый в этих экспериментах красный сдвиг линии экситонной фотолюминесценции с уменьшением размера структуры до $L_x, D \approx 100$ нм может быть объяснен частичной неоднородной упругой релаксацией ямного слоя. Для структур с меньшим поперечным размером связанный с деформацией красный сдвиг продолжает нарастать, однако оказывается скрыт сильным синим сдвигом, обусловленным размерным квантованием носителей. Отметим, что корректное квантовое описание этой системы должно включать учет неоднородных изменений положения границ зон, обусловленных релаксацией упругих напряжений в полупроводниковой наноструктуре, а также влияние большой разницы диэлектрических проницаемостей полупроводника и вакуума.

Авторы признательны М. Байеру (M. Bayer), А. Форхелю (A. Forchel) и В. Д. Кулаковскому за полезные обсуждения. Работа была частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 97-02-17872) и Программой «Наноструктуры» МНИГ (грант 97-1072). Один из авторов (Н. А. Г.) в настоящее время является стипендиатом фонда А. Гумбольта (A. v. Humboldt), университет г. Вюрцбург, Германия.

Литература

1. J. P. Reithmaier, R. Höger, H. Riechert, A. Heberle, G. Abstreiter, and G. Weimann, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 536 (1990).
2. K. Kash, R. Bhat, Derek D. Mahoney, P. S. D. Lin, A. Scherer, J. M. Worlock, B. P. Van der Graag, M. Koza, and P. Grabbe, *Appl. Phys. Lett.* **55**, 681 (1989).
3. K. Kash, B. P. Van der Graag, Derek D. Mahoney, A. S. Gozdz, L. T. Florez, and J. P. Harbison, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 681 (1989).
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1987).
5. Landolt-Börnstein, *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, New Series, III/17a, ed. by O. Madelung, Springer, Berlin (1982).
6. R. Steffen, Th. Koch, J. Oshiniwo, F. Faller, and A. Forchel, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 223 (1996); A. Forchel, Private communication.