

基于连续弹性理论分析量子线线宽 对应变分布和带隙的影响*

姚文杰[†] 俞重远 刘玉敏 芦鹏飞

(北京邮电大学光通信与光电子学研究院, 光通信与光波技术教育部重点实验室, 北京 100876)

(2007 年 12 月 24 日收到, 2008 年 3 月 3 日收到修改稿)

基于连续弹性理论分别采用数值方法和格林函数法讨论了量子线的应变分布. 格林函数法可以得到应变分布的解析表示式, 对规则形状的量子线的应变分布计算比较方便. 连续弹性理论采取的是数值解法, 结果精度不如格林函数法, 但是能方便计算任意形状量子线的应变分布情况, 并可以考虑不同材料的弹性常数的影响. 文章还具体讨论了量子线线宽对应变分布和带隙的影响. 结果表明: 沿线宽方向, 应变的绝对值逐渐减小, 并随线宽的增加而变大, 带隙则随线宽的减小而增大.

关键词: 连续弹性理论, 格林函数法, 应变, 带隙

PACC: 7115P, 7280E, 7320D

1. 引 言

随着光电材料和器件的发展, 低维半导体材料由于其特有的量子尺寸效应、量子隧穿效应、库仑阻塞效应以及非线性光学效应而成为新一代光电材料和器件的基础^[1,2]. 以量子线(QWR)为例, 量子线结构限制电子和空穴在两个方向的运动, 和普通结构相比更能改善器件的光电性能. 量子线结构的激光器比普通激光器具有以下几个优点: 更低的阈值电流(更好地接近零阈值)、更为良好的温度灵敏度、更窄的谱线宽度和更强的差分增益等^[3]. 通常量子线结构由两种晶格失配的材料构成, 晶格失配则会导致应变的产生. 由于应变将充分修改电子的能带结构, 从而严重影响 QWR 器件的光电性能, 故在设计 QWR 器件结构时, 应变的作用显得极为重要. 计算应变分布的方法有许多种, 如分子动力学理论、格林函数法、有限元方法^[4,5]和连续弹性理论^[6]等. 分子动力学理论主要利用两个或多个原子相互作用势, 因此势函数的选取非常重要, 对于不同的材料势函数的选择有所不同, 通常采用的势函数有 Stillinger-Weber(S-W)势和 Keating 势, 当系统的原子数目较多时, 分子动力学方法的效率急剧下降. 格

林函数法假定量子线埋藏在无限大或半无限大的衬底材料中, 这样量子线及其周围材料的应力应变分布可以转化为格林函数对量子线的闭合曲线积分, 从而得到解析解. 但是由于计算过于繁琐复杂, 对于截面形状规则的量子线计算较为方便, 不适合计算任意形状量子线的应力应变分布. 连续弹性理论则通过 Newton-Raphson 方法处理量子线系统的赫姆霍兹应变能, 然后利用超松弛迭代 Gauss-Seidel 方法对得到的耦合线性方程组求解, 即可求得相应的应力应变分布. 本文主要利用格林函数法和连续弹性理论研究量子线的应变分布情况, 并讨论量子线线宽对应变分布和带隙的影响.

2. 计算方法

2.1. 格林函数法计算 QWR 应变分布

QWR 结构中, QWR 材料和衬底材料晶格失配, 假定 QWR 材料埋藏在无限大衬底中, 可以忽略自由表面的影响, 同时认为这两种材料各向同性并且连续, 则可以利用格林函数方法求解 QWR 系统的应力应变分布情况. 任意点(x, y)处的应力分布可以由下式计算得到

* 国家自然科学基金(批准号: 60644004)和国家重点基础研究发展计划(批准号: 2003CB314901)资助的课题.

[†] E-mail: 1985yaowenjie@gmail.com

$$\sigma_{ij}(x, y) = -\chi_R \delta_{ij} 2\pi E \Lambda + \oint A_{ij}(x_0 - x, y_0 - y) \cdot d\mathbf{r}, \quad (1)$$

$i, j = x, y,$

逆时针方向沿 QWR 的边界进行曲线积分 (x_0, y_0) 是 QWR 边界上的点。(1)式中 $\Lambda = \varepsilon_0 E \Lambda [2\pi(1 - \nu)]$ 其中 E 为杨氏模量, ν 为泊松比。在 QWR 内部失配应变 $\varepsilon_0 = (a_s - a_q) / a_q$, 在 QWR 外部 $\varepsilon_0 = 0$, a_s 和 a_q 分别是衬底材料和 QWR 材料的晶格常数。对于 QWR 边界上的点 $\chi_R = 1$, 其余位置的点 $\chi_R = 0$ 。 $\delta_{ij} = 1, i = j; \delta_{ij} = 0, i \neq j$ 。 $A_{ij}(x, y)$ 的选择并不唯一, 只要能够满足格林函数方法的要求即可。基于(1)式得到的应力分布情况, 利用(2)式给出的胡克定律^[7]可以得到相应的正应变和切应变分布情况。

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{1}{E} [(1 - \nu^2)\sigma_{xx} - \nu(1 + \nu)\sigma_{yy}] \\ &\quad - \nu\varepsilon_0(x, y), \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{1}{E} [(1 - \nu^2)\sigma_{yy} - \nu(1 + \nu)\sigma_{xx}] \\ &\quad - \nu\varepsilon_0(x, y), \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{\nu(1 + \nu)}{E} \sigma_{xy}. \end{aligned} \quad (2)$$

2.2. 连续弹性理论计算 QWR 应变分布

基于连续弹性理论, QWR 的弹性应变能可以由下式给出^[8]

$$E = \int dS \frac{1}{2} C_{ijkl} [\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^{(0)}(\mathbf{r})] \times [\varepsilon_{kl}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^{(0)}(\mathbf{r})], \quad (3)$$

式中 C_{ijkl} 是弹性模量张量, $i, j, k, l = x, y$, $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ 是应变张量, $\varepsilon_{ij}^{(0)}(\mathbf{r})$ 是由晶格失配引起的本征局部应变。假定 QWR 与衬底的界面处存在突变, 则(3)式可以表示为

$$E = \int dS \frac{1}{2} C_{ijkl} [\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^{(0)}\delta_{ij}] \times [\varepsilon_{kl}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^{(0)}\delta_{kl}]. \quad (4)$$

(4)式中在 QWR 区域有: $\varepsilon_{xx}^{(0)} = \varepsilon_{yy}^{(0)} = (a_q - a_s) / a_s$, 在衬底处则 $\varepsilon_{xx}^{(0)} = \varepsilon_{yy}^{(0)} = 0$, a_q, a_s 分别是 QWR 材料和衬底材料未受应变影响时的晶格常数。 $\delta_{ij} = 1, i = j; \delta_{ij} = 0, i \neq j$ 。对于立方晶体(4)式可以扩展为

$$E = \int dS \left\{ \frac{1}{2} C_{xxxx} [\varepsilon_{xx}^2(\mathbf{r}) + \varepsilon_{yy}^2(\mathbf{r})] \right.$$

$$\begin{aligned} &+ C_{xyyy} \varepsilon_{xx}(\mathbf{r}) \varepsilon_{yy}(\mathbf{r}) + 2C_{xyxy} \varepsilon_{xy}^2(\mathbf{r}) \\ &- (C_{xxxx} + C_{xyyy}) [\varepsilon_{xx}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{yy}(\mathbf{r})] \\ &\left. + (C_{xxxx} + C_{xyyy}) \varepsilon_{xx}^{(0)} \varepsilon_{xx}^{(0)} \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

应变分量可以由位移矢量作如下定义

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial r_i} \right], \quad (6)$$

其中 $u(\mathbf{r})$ 为位移矢量。将(6)式代入到(5)式中, 设定边界处 $u(\mathbf{r}) = 0$, 利用超松弛迭代算法求解弹性应变能的极小值, 得到相应各点的位移值 $u(\mathbf{r})$, 再利用下式即可求得 QWR 内外的应变分布,

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial r_i} \right] - \varepsilon_{ij}^{(0)} \delta_{ij}. \quad (7)$$

2.3. 应变作用下的 QWR 带隙分析

通常, QWR 中的应变分布将较为明显地改变电子的能带结构。如: 静水应变对导带和价带边缘值有一个微小的平移, 而双轴应变则将价带分割为重空穴带和轻空穴带, 并对它们进行修正。根据 van de Walle 的固体模型理论, 可以具体讨论应变对带隙的影响。先选取一个能量基准值 $E_{v,av}^0$, 则导带能 E_c 、重空穴带能 E_v^{hh} 、轻空穴带能 E_v^{lh} 可以表示为^[9]

$$\begin{aligned} E_c &= E_{v,av}^0 + \frac{\Delta_0}{3} + E_g + \delta E_c, \\ E_v^{hh} &= E_{v,av}^0 + \frac{\Delta_0}{3} + \delta E_{v,hyd} - \frac{1}{2} \delta E_{v,bi}, \\ E_v^{lh} &= E_{v,av}^0 - \frac{\Delta_0}{6} + \delta E_{v,hyd} + \frac{1}{4} \delta E_{v,bi} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E_{v,bi} + \frac{9}{4} (\delta E_{v,bi})^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

其中 Δ_0 是材料未受应变时的自旋轨道分离能, E_g 是未受应变影响时的带隙值, δE_c 是应变对导带的修正值, $\delta E_{v,bi}$ 和 $\delta E_{v,hyd}$ 分别是双轴应变和静水应变对价带的修正值, 满足以下关系:

$$\begin{aligned} \delta E_c &= a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \\ &= a_c \varepsilon_{hyd}, \\ \delta E_{v,hyd} &= a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \\ &= a_v \varepsilon_{hyd}, \\ \delta E_{v,bi} &= b (2\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz}) \\ &= b \varepsilon_{bi}, \end{aligned} \quad (9)$$

其中 a_c, a_v 和 b 都是形变势参数, 可以由实验测得。根据平面应变条件, 在 QWR 区域 $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_0$; 在衬

底区域 $\epsilon_{zz} = 0$.

3. 结果与讨论

3.1. QWR 结构应变分布

对于 QWR 和衬底,模型^[10]中相应的材料分别为 InAs 和 GaAs,杨氏模量分别为 50.76 和 85.26 GPa,泊松比分别为 0.35 和 0.31,失配应变 $\epsilon_0 =$

-0.067 . InAs 的弹性常数为: $C_{xxxx} = 83.4$ GPa, $C_{xyxy} = 45.4$ GPa, $C_{xyyy} = 39.5$ GPa;GaAs 的弹性常数为: $C_{xxxx} = 119$ GPa, $C_{xyxy} = 53.4$ GPa, $C_{xyyy} = 59.6$ GPa. 图 1(a)和(b)分别给出了利用连续弹性理论和格林函数法计算三角形横截面的 QWR 结构的应变等值线分布.这两种方法所得到的应变分布基本类似,图 1(a)曲线不是很光滑,尤其在三角形三条边附近,曲线起伏较大;图 1(b)曲线光滑整齐,可见连续弹性理论得到的结果不如格林函数法精确.

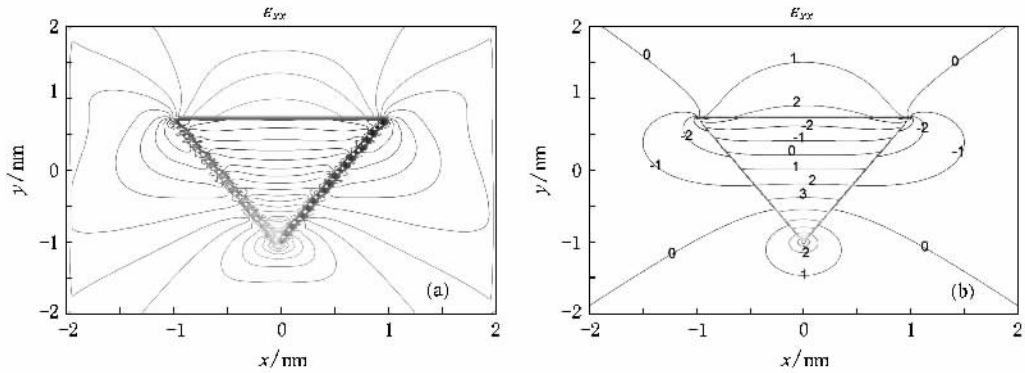


图 1 三角形 QWR 的应变分布 (a)基于数值连续弹性理论 (b)基于格林函数法

3.2. QWR 线宽对应变分布和带隙的影响

以矩形截面的 QWR 结构为模型,如图 2 所示,模型中 QWR 和衬底材料分别为 $In_{0.2}Ga_{0.8}As$ 和 GaAs,相应的杨氏模量分别为 78.56 和 85.26 GPa,泊松比分别为 0.318 和 0.312,由晶格失配引起的失配应变 $\epsilon_0 = -0.014$.

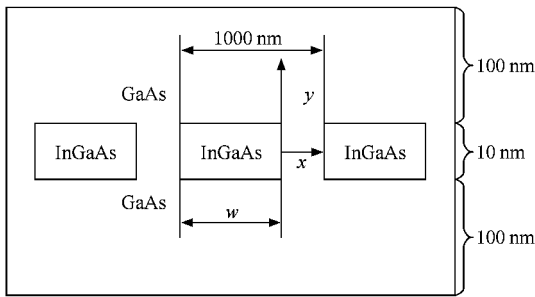


图 2 横向周期分布的 QWR 结构的界面图

横向周期保持 1000 nm 不变,考虑 QWR 线宽 w 分别为 50, 200 和 800 nm 时,线宽对各主应变、切应变、静水应变和双轴应变的影响.图 3(a)和(b)给出的分别是 w 变化时过 QWR 中心 ϵ_{xx} 和 ϵ_{yy} 沿 X 轴的

分布曲线: ϵ_{xx} 是压应变且沿 X 轴逐渐增大,而 ϵ_{yy} 正好与之相反.随着 QWR 线宽的增加,二者的绝对值逐渐变大.图 3(c)给出的是过 QWR 中心 ϵ_{xx} 沿 Y 轴的分布曲线:在 $In_{0.2}Ga_{0.8}As$ 区域, ϵ_{xx} 均匀分布,且 ϵ_{xx} 随 w 的增加逐渐减小,并趋于失配应变值 ϵ_0 ;在 GaAs 区域,当 w 值较小时, ϵ_{xx} 类似于线性变化,随着 w 的增加, ϵ_{xx} 值逐渐减小,并趋于均匀分布.图 3(d)给出的分别是过 QWR 中心静水应变 ϵ_{hyd} 和双轴应变 ϵ_{bi} 沿 X 轴的分布曲线: ϵ_{hyd} 在 $In_{0.2}Ga_{0.8}As$ 和 GaAs 区域都是均匀分布,并且基本不随 QWR 线宽 w 变化; ϵ_{bi} 沿 X 轴逐渐减小,随 w 的增加而逐渐变大.

根据 van de Walle 的固体模型理论讨论 QWR 线宽 w 对带隙的影响,所用到的参数如表 1 所示.图 4 则给出了具体的计算结果.我们可以从图 4 中得知:导带边的能量几乎不随 w 变化;在 $In_{0.2}Ga_{0.8}As$ 区域,重空穴带带边的能量随 w 的增加逐渐变大,轻空穴带边的能量随 w 的增加逐渐减小,而在 GaAs 势垒区重空穴带能量和轻空穴带能量随 w 的变化趋势正好与 $In_{0.2}Ga_{0.8}As$ 区域相反.

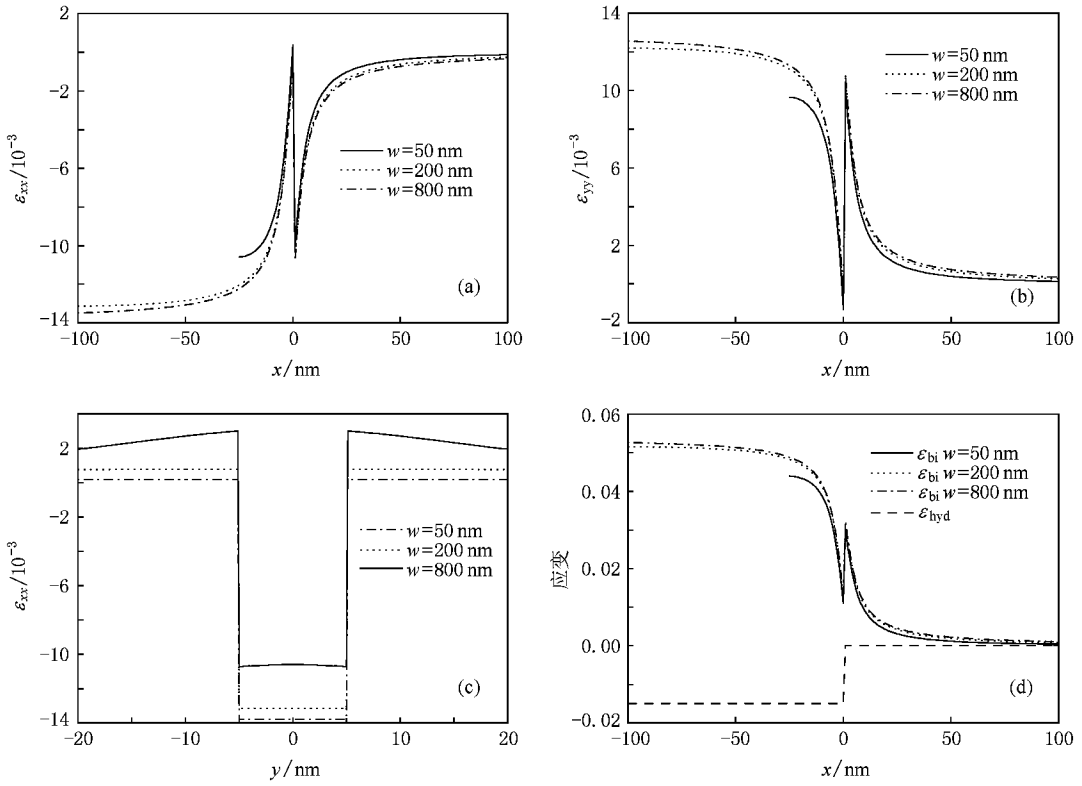


图3 QWR 线宽 w 分别为 50 200 和 800 nm 时 过 QWR 中心的应变分布图 (a)(b) 为 ϵ_{xx} 和 ϵ_{yy} 沿 x 轴的分布曲线 (c) 为 ϵ_{xx} 沿 y 轴的分布曲线 (d) 为 ϵ_{hyd} 和 ϵ_{bi} 沿 x 轴的分布曲线

表 1 讨论应变对带隙的影响时所用到的相应参数^[9]

	E_g/eV	Δ_0/eV	a_c/eV	a_v/eV	b/eV	$E_{v,av}^0/eV$
GaAs	1.519	0.341	-7.17	1.16	-1.70	-6.92
$In_{0.2}Ga_{0.8}As$	1.221	0.329	-6.75	1.13	-1.72	-6.87

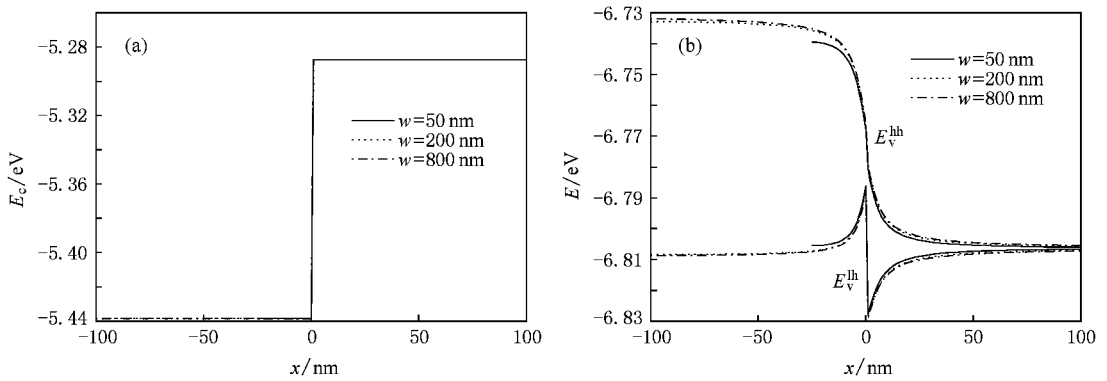


图 4 过 QWR 中心沿 x 轴方向导带 (a) 和价带 (b) 能量分布

4. 结 论

本文分别采用了格林函数法和数值连续弹性理

论两种方法对 QWR 结构的应变分布进行了研究, 讨论了 QWR 线宽对应变分布和带隙的影响. 结果表明 格林函数法能够解析求解, 但只能针对简单几何模型的 QWR 结构, 连续弹性理论可以较为容易

地计算任意形状的 QWR 应变分布,但它是数值解法,结果不如格林函数法精确.过 QWR 中心沿线宽方向,随 QWR 线宽的增加,应变的绝对值逐渐变大,导带边的能量几乎不随线宽变化,重空穴带边的

能量随线宽的增加逐渐变大,而轻空穴带边的能量的变化趋势与重空穴带能量相反.在以上讨论的基础上,我们可以进一步分析应变对 QWR 中电子结构和能级等的影响.

- [1] Yand M J , Bastard G 1994 *Solid State Commun.* **91** 39 477
- [2] Wang Z G 2002 *J. Synthetic Crystals* **31** 208 [in Chinese] 王占国 2002 *人工晶体学报* **31** 208]
- [3] Bimberg D , Grundmann M , Ledentsov N N 1998 *Quantum Dot Heterostructures* (London : John Wiley & Sons)
- [4] Liu Y M , Yu Z Y , Yang H B , Huang Y Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** **10** 5023 [in Chinese] 刘玉敏、俞重远、杨红波、黄永箴 2006 *物理学报* **55** **10** 5023]
- [5] Liu Y M , Yu Z Y , Huang Y Z 2007 *J. Mater. Sci. Technol.* **14**
- [6] Liu Y M , Yu Z Y , Yang H B , Huang Y Z 2005 *Chinese Journal of Semiconductor* **26** 2355 [in Chinese] 刘玉敏、俞重远、杨红波、黄永箴 2005 *半导体学报* **26** 2355]
- [7] Downes J , Faux D A 1995 *J. Appl. Phys.* **77** 2444
- [8] Jogai B 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 699
- [9] Yoo Y H , Lee W , Shin H 2004 *Semicond. Sci. Technol.* **19** 93
- [10] Faux D A , Downes J R , O 'Reilly E P 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 2515

Effect of wire width on strain distribution and bandgap in quantum-wire nanostructures based on continuum elasticity theory *

Yao Wen-Jie[†] Yu Zhong-Yuan Liu Yu-Min Lu Peng-Fei

(Institute of Optical Communication and Optoelectronics , Key Laboratory of Optical Communication and Lightwave Technologies of Ministry of Education (BUPT) , Beijing University of Posts and Telecommunications , Beijing 100876 , China)

(Received 24 December 2007 ; revised manuscript received 3 March 2008)

Abstract

The strain distributions of quantum-wire structures are discussed by two methods , namely the continuum elasticity theory treated as a finite difference problem and the Green-function. Analytical expressions are derived for the strain fields with Green-function , which is simple for the regular shaped quantum-wire. The strain fields for arbitrary-shaped quantum-wire can be calculated by continuum elasticity theory and the influences of elastic constants are considered for different materials , although the results are less accurate. The effect of quantum-wire width on strain distribution and bandgap is analysed for InGaAs/GaAs quantum-wire nanostructures. The absolute magnitude of the strain in the bulk of the wire is attenuated significantly along the width direction. At the wire center , the strain-modified direct bandgap increases with the decrease in wire width.

Keywords : continuum elasticity theory , Green-function , strain , bandgap

PACC : 7115P , 7280E , 7320D

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60644004) and the National Basic Research Program of China (Grant No. 2003CB314901).

[†] E-mail : 1985yaowenjie@gmail.com