

埋置量子点应力分布的有限元分析*

周旺民[†] 蔡承宇¹⁾ 王崇愚²⁾ 尹姝媛³⁾

1) 浙江工业大学机电工程学院 杭州 310032)

2) 清华大学物理系 北京 100084)

3) 浙江工业大学理学院 杭州 310023)

(2008 年 1 月 9 日收到, 2008 年 5 月 12 日收到修改稿)

通过衬底材料和外延材料的交替生长方式制备出多层排列的自组装量子点超晶格结构. 这些埋置量子点的应力/应变场影响着它们的光电性能、压电性能以及力学稳定性. 基于各向异性弹性理论的有限元方法, 研究了埋置金字塔形应变自组织 Ge/Si 半导体量子点的应力/应变分布以及流体静应变和双轴应变分布, 并与非埋置量子点的应力/应变分布做了比较, 指出了它们之间的异同以及覆盖层对量子点应力/应变分布的影响.

关键词: 量子点, 应力分布, 应变分布

PACC: 6220, 6150C, 6855, 8160C

1. 引 言

半导体量子点由于其特有的量子效应在新一代光电器件的研制方面具有很大的前景, 用半导体量子点材料制备出来的纳米光电器件具有超高速、超高频、高集成度、高效低功耗和极低的阈值电流密度等特点, 因此量子点在未来的纳米电子学、光学和光电集成等方面都有极高的应用价值^[1-4]. 通过衬底材料和外延材料的交替生长方式已制备出垂直排列的自组装量子点超晶格结构^[5, 6], 这些埋置量子点的应力/应变场对它们光电性能、压电性能以及力学稳定性的影响已有很多报道^[7-13]. 例如, Gosling 和 Willis^[7]对两种材料体系 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 和 $\text{Ge}_x/\text{Si}_{1-x}$ 研究了埋置量子点排列的力学稳定性和电子性能. Grundmann 等^[8]对 InAs/GaAs 估计了 InAs 量子点应变诱生的光学声子和带隙的相对移动. 这些理论分析与实验结果相符^[7, 8]. Davies^[10]研究了量子点结构应变诱生的压电场. 应变场在制备自组装紧密层排与垂直排列量子点超晶格结构也有重要的作用^[12, 14]. 从这些研究结果可以看出, 研究量子点中的应力/应变场对于量子点的生长及它们的物理性能都是非常重要的.

计算由晶格错配引起的量子点应力/应变分布

的方法主要有数值有限元法^[15-18], 原子模拟方法^[19, 20]和解析连续力学方法^[21]. 原子模拟方法基于球和弹簧模型, 用原子间的少体势描述应变能, 通过最小化应变能得到应变场, 经验势或量子力学 Schrödinger 方程用于计算. 由于需要大量的原子用于模拟, 使得原子模拟方法的计算量过于浩大, 目前仅限于小体系量子点. 解析连续力学方法是把量子点作为衬底中的夹杂来处理, 通过在整个夹杂体积上积分 Green 函数得到由于量子点与衬底之间的晶格错配产生的应力/应变场. 然而, 这种积分仅适用于一些简单形状的夹杂. 与这两种方法相比, 有限元方法计算量子点的应力/应变场更为有效, 能处理任何大小、任何几何形状的量子点结构. 我们基于各向异性弹性理论的有限元方法研究了埋置金字塔形 Ge/Si 半导体量子点内的应变/应力分布及流体静应变与双轴应变分布, 并与无覆盖层的量子点应力/应变分布^[18]做了比较, 指出了它们之间的异同以及覆盖层对量子点应力/应变分布的影响.

2. 几何模型和本构方程

根据分子束外延实验技术和透射电子显微镜的观测^[22, 23], 我们考虑异质外延 Ge/Si 量子点体系, 其几何模型如图 1 所示. 模型下方是 Si 衬底, 上面覆

* 国家自然科学基金(批准号 90101004)资助的课题.

[†] E-mail: wangminzhou@sohu.com

盖着 Ge 浸润层, 浸润层的厚度取为 $\frac{1}{2} a_{\text{Ge}}$ 约为 2 个单原子层, 浸润层上面是一个 Ge 金字塔形量子点, 量子点的上方覆盖着一层厚度为 30 nm 的 Si. 量子点的高为 h , 底边长为 b , 高宽比为 $r = h/b$. 金字塔(量子点)的体积 $V_q = \frac{1}{3} b^2 h = \frac{1}{3} b^3 r$. 我们取 $V_q = 450 \text{ nm}^3$, 但高宽比 r 可以自由变化.

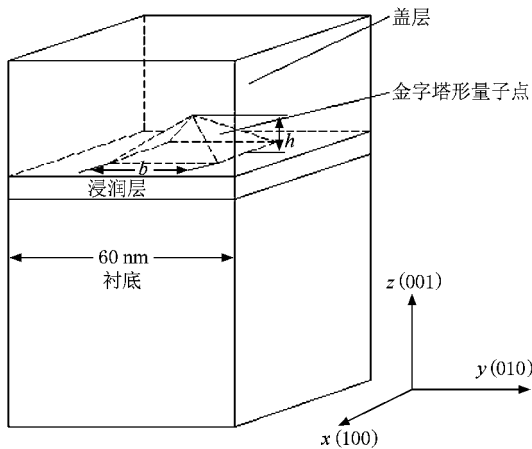


图 1 埋置金字塔形量子点几何模型

由于衬底材料的晶格常数 a_{Si} 与外延材料晶格常数 a_{Ge} 不同, 使得异质外延量子点体系具有错配应变或称本征应变 $\epsilon_{xx}^m = \epsilon_{yy}^m = \epsilon_{zz}^m = \epsilon_0 K(x, y, z)$, $\epsilon_{ij}^m = \alpha (i \neq j)$ 这里假定界面上没有衬底与外延材料混合, 坐标原点位于 Ge/Si 浸润层与衬底界面中心), 其中晶格错配 $\epsilon_0 = (a_{\text{Si}} - a_{\text{Ge}}) / a_{\text{Si}}$, $K(x, y, z)$ 是量子点特征函数, 即坐标位于外延材料 Ge 内时为 1, 位于材料 Si 内时为 0. 我们的理论分析基于量子点体系的线弹性理论.

异质外延体系生长过程的应变 ϵ_{ij} 为弹性(弛豫)应变 ϵ_{ij}^e 与错配应变 ϵ_{ij}^m 之和, 即

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^e + \epsilon_{ij}^m \quad (i, j = x, y, z). \quad (1)$$

应变 ϵ_{ij} 与位移 u_i 的关系为

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2)$$

应力 σ_{ij} 与应变 ϵ_{ij} 的关系通过立方晶系的本构方程表征, 即

$$\begin{aligned} \sigma_{ii} &= (C_{11} - C_{12}) \epsilon_{ii} + C_{12} \epsilon_h, \\ \sigma_{ij} &= C_{44} \epsilon_{ij} \quad (i \neq j), \end{aligned} \quad (3)$$

其中流体静应变 $\epsilon_h = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$, C_{11} , C_{12} , C_{44} 是弹性常数. 表 1 给出了 Si 和 Ge 的晶格常数与弹性

常数值.

表 1 Si 和 Ge 的晶格常数与弹性常数^[24]

	晶格常数/nm	$C_{11}/10^{11} \text{ Pa}$	$C_{12}/10^{11} \text{ Pa}$	$C_{44}/10^{11} \text{ Pa}$
Si	0.54305	1.6564	0.6394	0.7951
Ge	0.5658	1.240	0.413	0.683

把方程(1)代入方程(3)得到

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^e + \sigma_{ij}^m. \quad (4)$$

这里弹性(弛豫)应力

$$\begin{aligned} \sigma_{ii}^e &= (C_{11} - C_{12}) \epsilon_{ii}^e + C_{12} \epsilon_h^e, \\ \sigma_{ij}^e &= C_{44} \epsilon_{ij}^e \quad (i \neq j), \end{aligned} \quad (5)$$

式中

$$\epsilon_h^e = \epsilon_{xx}^e + \epsilon_{yy}^e + \epsilon_{zz}^e.$$

错配应力

$$\begin{aligned} \sigma_{ii}^m &= (C_{11} + 2C_{12}) \epsilon_0 K(x, y, z), \\ \sigma_{ij}^m &= 0 \quad (i \neq j). \end{aligned} \quad (6)$$

不计体力时, 量子点体系弹性变形的平衡方程为

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^e}{\partial x_j} = 0. \quad (7)$$

这里重复指标表示求和. 由方程(4)–(7), 平衡方程可表示为

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^e}{\partial x_j} - (C_{11} + 2C_{12}) \epsilon_0 \frac{\partial K}{\partial x_i} = 0. \quad (8)$$

边界条件是外表面应力自由, 即

$$\sigma_{ij} n_j = 0, \quad (9)$$

其中 $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 是表面外法向单位矢量.

从所产生的力学效应看, 方程(8)–(9)表明错配应变相当于在外延材料内所施加的体力. 确定量子点应力、应变与应变能分布就归结为在边界条件(9)下求解方程(8).

3. 量子点应力应变分布的有限元分析

根据上述量子点几何模型、平衡方程和边界条件, 考虑到由于特征函数 $K(x, y, z)$ 在界面上的不连续性所导致数学处理上的困难, 我们这里采用所谓的“热膨胀法”^[25, 26], 使用商用有限元程序 ANSYS^[27] 对不同高宽比金字塔形量子点的应力、应变和应变能进行了系统详尽的有限元分析计算. 在衬底底面施加固定位移边界条件, 衬底的厚度取作 100 nm, 这样的尺度足以把衬底上方及量子点、覆盖层作为“远场”考虑, 即衬底底面的边界条件对有限

元计算结果几乎没有影响. 其余各边界面施加应力自由边界条件. 对量子点及浸润层, 把 Ge/Si 的晶格错配 0.04 当作 x, y, z 三个方向的热膨胀系数, 衬底的热膨胀系数设为零, 把整个量子点体系 Ge/Si 的温度升高 1 K, 这就形成了有限元计算模型的应变载荷(实质上在 Ge 中施加了等价的错配应变), 这样的热膨胀方法与求解方程组(8)(9)等价. 根据量子点体系几何模型特征与材料晶体结构特点, 在有限元计算中我们在衬底部分采用 8 节点六面体单元, 网格划分自上而下由密逐渐变疏; 在量子点及邻近界面部分采用 8 节点四面体单元对模型进行网格划分, 网格划分较密, 以适应量子点各单元变形的协调性. 这里采用 8 节点单元, 就是以二次多项式作为插值函数逼近位移函数, 从而保证了位移函数及应变函数(位移函数的一阶导数)乃至应力在单元界面上的连续性. 这样, 只要单元网格的尺度足够小, 就能满足所需的计算精度要求, 避免了选取网格对计算的敏感性. 这里, 我们以界面上的应变能密度(最大应变能密度)的误差小于 5% 作为收敛判据. 为了便于和非埋置量子点体系应力/应变分布情况^[18]进行比较, 这里仅给出体积为 450 nm^3 、高宽比为 0.18 时量子点应力/应变分布.

图 2 是过量子点底面中心沿 [100] 方向应力 σ_{xx} 分布曲线, 该应力的定性特征与非埋置情形时相似, 都表现为压应力, 其大小沿着 [100] 方向由浸润层的侧边界向里逐渐增大, 在量子点底部边缘处达到最大值, 在量子点内部又逐渐减弱. 相对于非埋置情况, 埋置量子点底部边缘处的压应力要小 24% 左右, 且在量子点内部应力减弱很快.

[100] 方向由浸润层的侧边界向里逐渐增大, 并在量子点底部边缘处达到最大值, 在量子点内部又逐渐减小. 定性特征与非埋置情形类似. 但与非埋置量子点的应变分布相比, 埋置量子点最大应变要小 20% 左右.

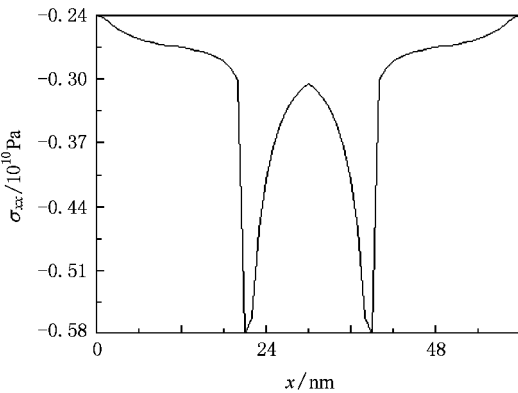


图 2 过量子点底面中心沿 [100] 方向应力 σ_{xx} 分布曲线

图 3 给出过量子点底面中心沿 [100] 方向应变 ϵ_{xx} 分布曲线, 此应变的特征是压应变, 其大小沿着

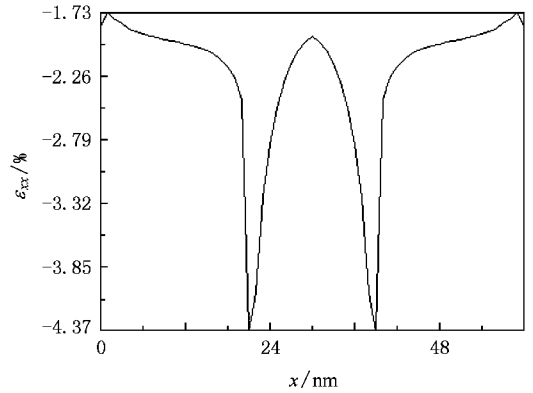


图 3 过量子点底面中心沿 [100] 方向应变 ϵ_{xx} 分布曲线

图 4 是从衬底底部沿 [001] 方向通过量子点顶点直到覆盖层顶部的正应力 σ_{zz} 分布曲线. 从图 4 可以看出, 在衬底底部和覆盖层顶部区域应力的变化很小, 趋近于零, 在接近于浸润层时应力急剧增大, 在衬底和浸润层的界面处压应力达到最大, 其后在量子点内部沿其生长方向逐渐减弱. 值得注意的是, 该应力在量子点内部, 埋置量子点是压应力, 而非埋置量子点是张应力, 这就是覆盖层对量子点应力的一个明显影响.

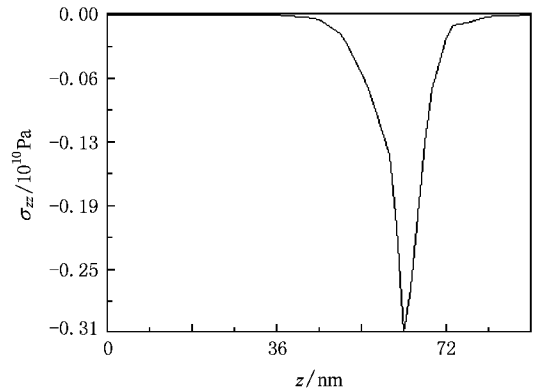


图 4 过量子点顶点沿 [001] 方向正应力 σ_{zz} 分布曲线

图 5 是从衬底底部沿 [001] 方向通过量子点顶点直到覆盖层顶部的正应变 ϵ_{zz} 分布曲线, 在衬底内应变的趋势比较平缓. 如图 5 所示, 在界面附近有一很大的突变, 应变从张应变急剧地变成压应变. 之后沿量子点的生长方向逐渐减弱, 趋于平缓.

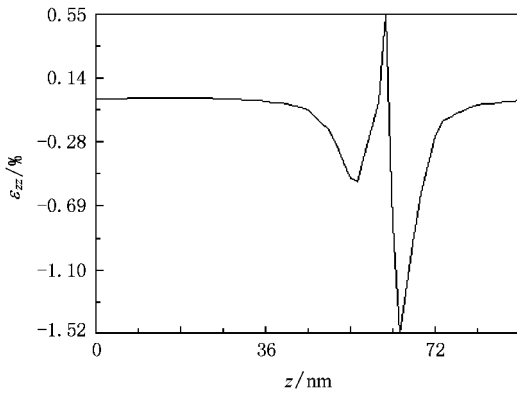
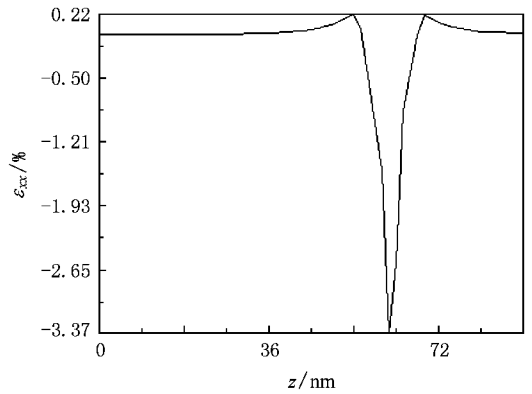
图 5 过量子点顶点沿 [001] 方向正应变 ϵ_{zz} 分布曲线图 7 过量子点顶点沿 [001] 方向正应变 ϵ_{xx} 分布曲线

图 6 和图 7 分别是 从衬底底部沿 [001] 方向经过量子点顶点一直到覆盖层顶部的应力 σ_{xx} 和应变 ϵ_{xx} 分布曲线. 从图 6 和图 7 可以看出, 在接近衬底/浸润层界面处的应力/应变也急剧突变, 在此界面处压应力/应变达到最大值, 之后沿着量子点的生长方向, 在量子点内部应力和应变都逐渐减弱. 在衬底和覆盖层内, 两者变化比较平缓.

$\epsilon_{zz} - (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})/2$ 这两种应变对电子的势能曲线和光波的分立性以及空穴状态起着决定性的作用, 因此流体静应变和双轴应变的分布趋势对于研究量子点器件的光电性能是非常重要的. 图 8 是从衬底底部沿 [001] 方向通过量子点顶点一直到覆盖层顶部的流体静应变 ϵ_h 和双轴应变 ϵ_b 分布曲线. 在衬底内两者的变化很平缓, 在衬底和浸润层的界面附近 ϵ_h 和 ϵ_b 都达到最大值, 此时的 ϵ_h 为压应变, ϵ_b 为张应变. 此后在量子点内逐渐减弱, 在覆盖层内趋于平缓, 大小与在衬底内基本一致. 在量子点内部, 埋置与非埋置量子点的这两个应变的变化特征基本一致, 所不同的只是大小的差异, 其最大值分别相差约 30% 和 40% .

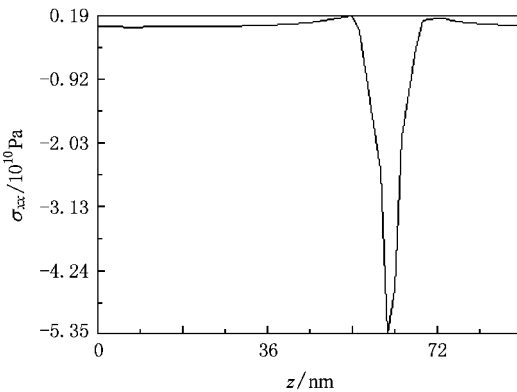
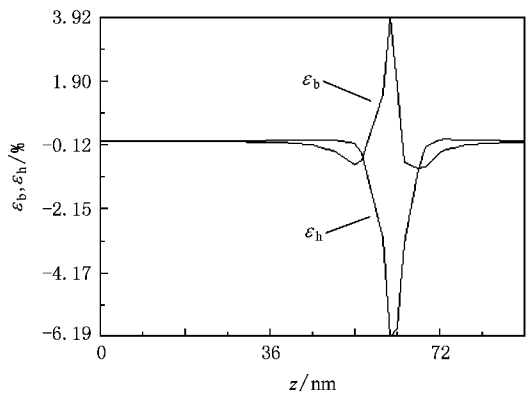
图 6 过量子点顶点沿 [001] 方向正应力 σ_{xx} 分布曲线

图 8 过量子点顶点沿 [001] 方向流体静应变和双轴应变

通过对以上应力/应变分布曲线的分析和比较可知, 应力/应变的变化主要集中在浸润层和量子点内, 衬底和覆盖层内的变化较小. 与非埋置量子点体系相比较, 埋置量子点体系的最大压应变(压应力)同样出现在量子点侧边与浸润层的交界处, 两者应力/应变分布有着相似的变化规律. 但是在同一体积、同一高宽比的情况下, 埋置量子点内的压应变较非埋置情形相对要小. 由此可见, 当量子点生长完成之后, 在量子点上覆盖层的生长过程中, 量子点体系进一步发生了应变弛豫.

4. 结 论

基于各向异性弹性理论的有限元方法, 研究了埋置金字塔形应变自组织 Ge/Si 半导体量子点的应

流体静应变 $\epsilon_h = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$ 和双轴应变 $\epsilon_b =$

力/应变分布以及流体静应变和双轴应变分布,并与非埋置情况下的应力应变分布进行了详细比较.结果表明,两者的应力/应变有着相似的变化规律,应变(应力)的变化主要集中在浸润层和量子点内,衬

底和覆盖层内的变化很小.相比于非埋置量子点,埋置量子点应力/应变相对要小.由此可知,当量子点生长完成之后,在其后覆盖层的生长过程中量子点进一步发生了应变弛豫.

- [1] Alivisatos A P 1996 *Science* **271** 933
- [2] Fafard S, Hinzer K, Raymond S, Dion M, McCaffrey J, Feng Y, Charbonneau S 1996 *Science* **274** 1350
- [3] Phillips J, Kamath K, Bhattacharya P 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 2020
- [4] Kim S, Mohseni H, Erdtmann M, Michel E, Jelen C, Razeghi M 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 963
- [5] Xie Q, Madhukar A, Chen P, Kobayashi N P 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 2542
- [6] Solomon G, Trezza J A, Marshall A F, Harris J S 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 952
- [7] Gosling T J, Willis J R 1995 *J. Appl. Phys.* **77** 5601
- [8] Grundmann M, Stier Q, Bimberg D 1995 *Phys. Rev. B* **52** 11969
- [9] Downes J R, Faux D A, O'Reilly E P 1995 *Mater. Sci. Eng. B* **35** 357
- [10] Davies J H 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 1358
- [11] Davies J H 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 4142
- [12] Heidemeyer H, Denker D U, Muller C, Schmidt O G 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 196103
- [13] Zervos M, Feiner L F 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 281
- [14] Holy V, Springholz G, Pinczolis M, Bauer G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 356
- [15] Liao X Z, Zhou J, Cockayne D J H, Leon R, Lobo C 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 5148
- [16] Kret S, Benabbas T, Delamarre C, Androussi Y, Dubon A, Laval J Y, Lefebvre A 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 1988
- [17] Zhou W M, Wang C Y, Chen Y H, Wang Z G 2006 *Chin. Phys. Lett.* **15** 1315
- [18] Cai C Y, Zhou W M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4841 (in Chinese) [蔡承宇、周旺民 2007 物理学报 **56** 4841]
- [19] Cusack M A, Briddon P R, Jaros M 1996 *Phys. Rev. B* **54** R2300
- [20] Kikuchi Y, Sugii H, Shintani K 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 1191
- [21] Glas F 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 3232
- [22] Grundmann M, Christen J, Ledentsov N N, Böhrer J, Bimberg D 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4043
- [23] Liu H Y, Xu B, Chen Y H, Ding D, Wang Z G 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 5433
- [24] Deng Z J, Zheng A S 2004 *Semiconductor Material* (Beijing : Chemical Industry Press) (in Chinese) [邓志杰、郑安生 2004 半导体材料 (北京 : 化学工业出版社)]
- [25] Benabbas T, Androussi Y, Lefebvre A 1999 *J. Appl. Phys.* **86** : 1945
- [26] Liu P, Zhang Y W, Lu C 2003 *Phys. Rev. B* **68** :195314
- [27] Zhang C H 2008 *ANSYS II . 0* (Beijing : China Machine Press) (in Chinese) [张朝晖 2008 ANSYS II . 0 北京 : 机械工业出版社]

Finite element analysis on stress distribution in buried quantum dots^{*}

Zhou Wang-Min^{1)†} Cai Cheng-Yu¹⁾ Wang Chong-Yu²⁾ Yin Shu-Yuan³⁾

¹⁾ College of Mechanical and Electrical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310032, China)

²⁾ Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

³⁾ College of Science, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310023, China)

(Received 9 January 2008 ; revised manuscript received 12 May 2008)

Abstract

The stacked, self-assembled and vertically aligned quantum dot superlattices are fabricated by alternating growth of substrate and epitaxial materials, the stress/strain fields in the buried quantum dots can influence their optical and piezoelectric properties and mechanical stability. The distributions of stresses, strains, hydrostatic strains and biaxial strains in buried strain self-assembled Ge/Si semiconductor quantum dot are investigated based on the theory of anisotropy elasticity and also compared with those of free-standing quantum dot. The sameness and difference of the stresses/strains between the buried and the free-standing quantum dots, and the influence of cap layer on the stress/strain fields in quantum dots are given.

Keywords : quantum dots, stress distribution, strain distribution

PACC : 6220, 6150C, 6855, 8160C

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 90101004).

[†] E-mail : wangminzhou@sohu.com