

InAs/GaAs 透镜形量子点超晶格材料的纵向和 横向周期对应变场分布的影响^{*}

刘玉敏^{1)†} 俞重远^{1)‡} 杨红波^{1)‡} 黄永箴³⁾

1) 北京邮电大学理学院, 北京 100876)

2) 北京邮电大学光通信与光波技术教育部重点实验室, 北京 100876)

3) 中国科学院半导体研究所集成光电子学国家重点实验室, 北京 100083)

(2005 年 11 月 7 日收到, 2005 年 11 月 23 日收到修改稿)

对量子点超晶格材料中量子点纵向周期和同层量子点的横向周期间距对量子点及其周围应变场分布的影响进行了系统的研究. 结果表明, 横向和纵向周期通过衬底材料之间的长程相互作用对量子点沿中心轴路径应变场分布的影响效果正好相反, 在适当条件下, 两者对量子点应变场分布的影响可以部分抵消. 同时也论证了在单层量子点和超晶格量子点材料中, 计算量子点的电子结构时, 应综合考虑量子点空间周期分布对载流子限制势的影响, 不能简单的利用孤立量子点模型来代替.

关键词: 应变, 半导体量子点, 自组织

PACC: 0365, 2110D

1. 引 言

三维受限的量子点系统与传统的体材料、一维受限量子阱材料以及二维受限量子线材料相比具有独特的类原子电子能态特性^[1-3] (在矩阵材料的宽带隙内具有离散电子能级), 使其在光电子和微电子器件领域引起广泛关注^[4-6]. 量子点材料的制备方法很多, 常用的有两种^[5]: 一是外延生长与刻蚀技术相结合制成量子点; 另一种是 S-K 生长模式, 适用于晶格失配较大材料, 该生长模式下应变外延层和衬底间的界面能大于衬底材料的表面能, 根据能量越低系统越稳定的原理, 外延生长初始阶段二维层状生长是有利的, 二维层称之为浸润层. 随着层厚的增加, 应变能不断积累, 达到某一个临界厚度, 可能导致位错发生, 如果原子的扩散长度很大, 则外延生长可能由二维层状生长过渡到三维岛状生长, 同时释放应变以降低系统的能量, 这样就自组装生成量子点. 在生长的单层量子点基础上, 重复上述的生长过程可获得量子点超晶格, 以提高量子点的密度. 第

一种生长方法的优点是量子点尺寸、形状和密度可控, 但由于加工带来的界面损伤和工艺过程引入的杂质污染等, 使器件性能与理论预期相差甚远, 因此研究的热点集中在自组装量子点生长方式上, 自组装量子点的有序性、大小和尺寸的控制依赖于自组装生长过程的自组织特性, 对生长条件要求较高, 并且只能做到初步的可控.

本文主要讨论量子点的周期性对应变分布的影响. 讨论应变分布, 尤其是自组织生长量子点材料的应变分布具有十分重要意义, 主要表现在两个方面: 第一, 应变是量子点自组织生长的主要驱动力, 了解应变分布, 才能更好的理解量子点自组织生长过程的机理; 第二, 应变分布能够对载流子引起附加的限制势, 从而对量子点的电子结构产生影响^[8]. 另外, 对于氮化合物半导体量子点材料, 由于压电效应比较明显, 应变导致的压电势对载流子的影响也不能忽视^[9].

已经有很多理论工作者用多种方法对量子点的应力分布进行了讨论. 如分子运动学理论^[10], 解析连续性方法^[11], 有限差分法和有限元法^[12]. 李树深等

^{*} 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2003CB314901), 国家高技术研究发展计划(批准号: 2003AA311070) 和集成光电子学国家重点联合实验室开放课题资助的课题.

[†] E-mail: liuyuminhq@263.net

已经利用有效质量理论对周期耦合量子点的电子结构及其发光特性进行了大量研究^[13-15]. 本文利用有限元法研究类透镜形状量子点的应力应变分布情况, 比较量子点排列的不同横向和纵向周期对单个量子点内部和周围材料应变场的影响. 当纵向周期无穷大时, 实际描述的为单层量子点系统, 横向周期无穷大的情况对应单列量子点系统, 当纵向和横向周期都无穷大时, 描述的为孤立的量子点系统. 建立这几种模型是为了研究空间周期分布对量子点应变场分布的影响.

2. 理论模型

利用有限元法进行量子点结构的研究多在二维平面上采用轴对称模型, 这样在计算大尺寸和多量子点系统时减少了计算量^[16]. 对于二维情况, x 和 y 方向的位移可以通过形函数节点位移的插值表示为

$$\begin{Bmatrix} u_x \\ u_y \end{Bmatrix} = [N] \{u\}_e, \quad (1)$$

$$[N] = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 \end{bmatrix}, \quad (2)$$

$$\{u\}_e^T = \{u_{x1} \ u_{y1} \ u_{x2} \ u_{y2} \ u_{x3} \ u_{y3} \ u_{x4} \ u_{y4}\}, \quad (3)$$

(2) 式为形函数矩阵, (3) 式为节点位移. 对于四边形分割的有限元元素, 形函数矩阵元表示为

$$N_j = \frac{1}{4}(1 + \zeta_j \xi)(1 + \eta_j \eta), \quad (4)$$

其中 ξ 和 η 为自然坐标. 描述力学系统的拉格朗日方程表示为

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) + \frac{\partial D}{\partial q_j} + \frac{\partial U}{\partial q_j} = Q_j, \quad (5)$$

$j = 1, 2, \dots, m,$

其中 T 表示系统动能, U 表示系统应变能, D 表示系统的耗散函数, q_j 表示归一化位移, Q_j 表示归一化的系统作用力. 由于我们讨论的量子点系统为静态问题, 系统耗散函数可以忽略, 因此方程 (5) 转化为一般的本构方程^[17]

$$\sigma = c \varepsilon + \varepsilon_T, \quad (6)$$

其中 c 为材料特性矩阵, ε_T 表示热应变. 将 (6) 式代入 (5) 式, 推导出每个元素的本构方程形式

$$[k]_e \{u\}_e = \{f\}_e, \quad (7)$$

其中 $[k]_e$ 是元素劲度矩阵, $\{f\}_e$ 为元素力矢量. 所有元素的矩阵方程可以表示为

$$[K] \{u\} = \{f\}, \quad (8)$$

其中 $[K]$ 为总体刚度矩阵, $\{u\}$ 为总体位移矢量, $\{f\}$ 为总体力矢量.

本文选择典型的实验室观察到的类透镜形量子点作为研究对象, 考虑其形状的中心轴对称性, 可以在二维平面上采用轴对称模型进行分析^[18], 为便于比较, 分析过程中不同模型下量子点的尺寸(横向和纵向)保持不变. 为了研究横向和纵向周期的变化对量子点应变场的影响, 在生长方向, 改变量子点层与层之间的隔离层厚度来调节纵向周期, 在水平方向上, 改变量子点中心间距来调节横向周期. 我们定义量子点高度 $h = 5 \text{ nm}$, 曲率半径为 $R = 8 \text{ nm}$, 基底半径为 $l = 7.4 \text{ nm}$, 图 1 给出了透镜形量子点形态参量之间的关系. 尽管浸润层对应力应变分布无明显影响^[19], 考虑真实模型的完整性, 在计算中我们考虑了浸润层, 并假定浸润层厚度为 0.3 nm . 在建立的仿真模型中, 为充分考虑同层和不同层之间量子点弹性场的相互作用, 假定量子点在纵向和横向上均匀排列, 建立了 7 个纵向排列的量子点层. 在实际仿真时, 水平方向两侧采用周期边界条件, 因此考虑横向间距的作用时, 没有必要建立 7 列量子点, 只要控制周期边界到量子点中心的距离就行了. 对于纵向方向, 衬底采用固定位移边界条件, 盖层表面为自由表面, 不施加边界条件. 由于纵向方向上表面和下表面不能采用周期边界条件, 因此考虑纵向周期的作用时必须建立多层量子点超晶格. 材料的弹性常数特性采用各向同性近似. 弹性常数和晶格常数如表 1.

表 1 InAs/GaAs 量子点的泊松比、杨氏模量与晶格常数

材料	E/GPa	ν	晶格常数 (a)
GaAs	86.96	0.31	5.65325
InAs	51.42	0.35	6.05830

图 2 给出了本文分析用到的三种结构的物理模型, 采用右手坐标系, 水平方向为 x 方向, 沿 (100) 方向, 竖直方向为 z 方向, 即量子点的生长方向, 沿 (001) 方向, 图 2 是三维情况下 $y = 0$ 时的剖面图. 研究横向周期对应变场的影响时, 采用图 2(a) 所示的单层量子点结构, 量子点横向周期间隔分别为 12.5, 15, 20, 30 以及 60 nm (等价于无穷周期情况), 五种情况下量子点系统横向周期对应变场分布的影响. 图 2(b) 为单列量子点结构, 取纵向周期间隔分别为 6, 8, 10 nm 和无穷间隔情况下量子点的应变场分布. 尽管在实际中不可能应用这样的单列量子点器件, 但单独讨论有利于理解纵向周期间隔对应变

场分布的影响.图 2(c)为量子点超晶格材料结构,可用于分析纵、横周期综合作用下对量子点应力分布的影响.讨论纵向周期的影响时,我们令横向周期为无穷大($p_t > 60 \text{ nm}$);讨论横向周期的相互作用时,我们假定纵向周期无穷大($p_l > 60 \text{ nm}$);纵向周期和横向周期共同作用时,纵向周期和横向周期都小于 60 nm ;当纵向和横向周期都大于 60 nm 时,可以看作是孤立量子点系统模型.

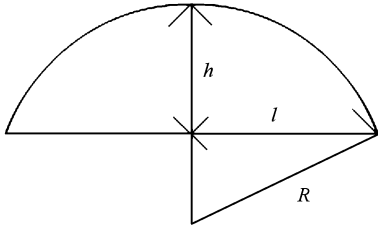


图 1 量子点的高度、基底长度和曲率半径 R 的关系示意图

应变载荷是由于衬底和量子点材料晶格失配引起的,利用量子点材料各个方向经历均匀热膨胀来表示,令材料的热膨胀系数为晶格失配的绝对值,量子点和浸润层经历 1K 的温度变化^[20].系统无其他载荷以及边界条件约束.

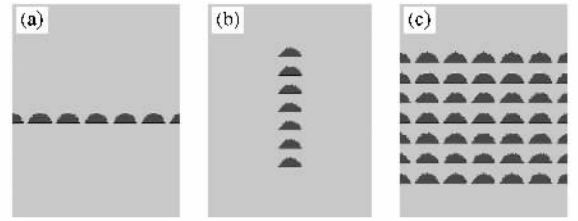


图 2 横向和纵向周期结构量子点模型

3. 结果与讨论

图 3(a)(b)和(c)定性的给出了横向周期为 30 nm 纵向周期为 8 nm 时 ϵ_{xx} , ϵ_{yy} 和 ϵ_{zz} 应变分量的分布色图.图 3(d)(e)(f)给出了横向周期为 30 nm 纵向周期为 10 nm 时 ϵ_{xx} , ϵ_{yy} 和 ϵ_{zz} 应变分量的分布色图.

可以看出具有周期排列的超晶格量子点模型,各个分量的应变分布都具有明显的周期性.从量子点的应变分布色图中来看,沿量子点中心轴从上到下不同层量子点的内部应变有明显变化,最上层和最下层量子点内部的应变分布比较一致,中间层差别最大.定性的比较纵向周期分别为 8 和 10 nm 时 ϵ_{xx} 分量的应变分布可以看出,当纵向周期变小时,

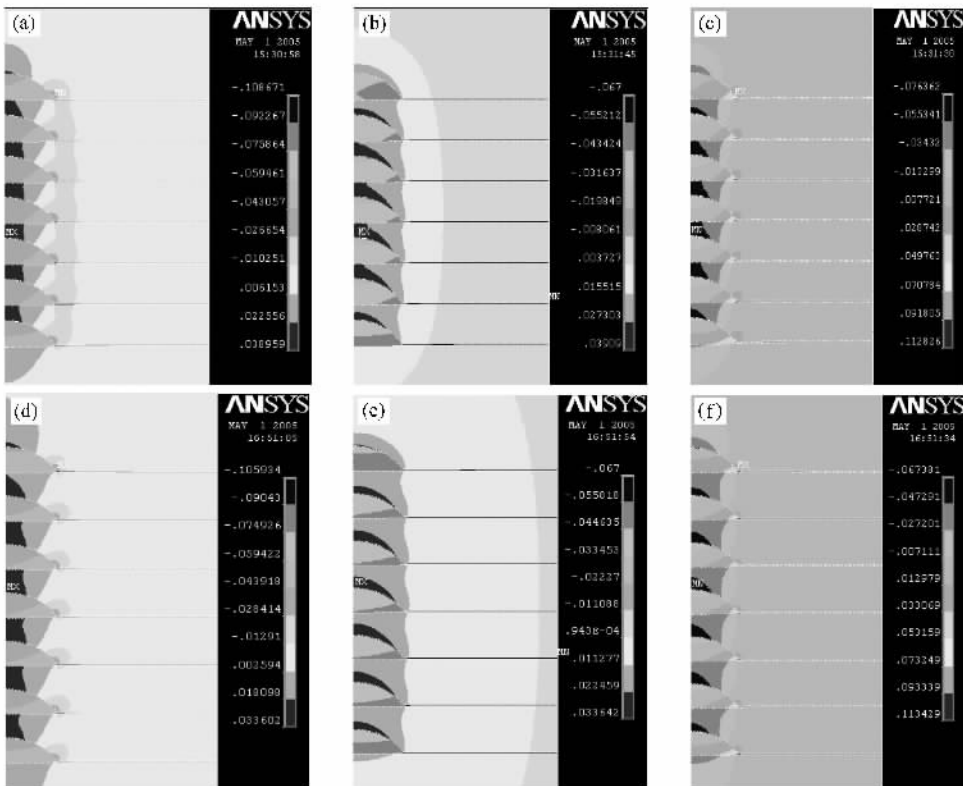


图 3 不同量子点周期分布情况下 ϵ_{xx} , ϵ_{yy} 和 ϵ_{zz} 的应变分布图

在量子点的右侧边界,应变分布有明显的重叠,并连成一片.当纵向周期为 10 nm 时,只在量子点的顶部有应变重叠区域,右侧边界区域没有应变场分布的重叠区域.由于空间周期分布对材料影响最明显的部分为模型里的中心量子点,下面的讨论中,我们的重点是不同周期情况下中心量子点的各个应变分量在中心轴路径的分布情况.由于采用轴对称模型,在中心轴路径上,满足 $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$,后续讨论中,沿中心轴路径的应变不再给出 ϵ_{yy} 的分布情况.流体静应变和双轴应变对于导带和价带载流子限制势具有重要的影响^[8],流体静应变可以表示为 $\epsilon_{hyd} = \epsilon_{xx} + \epsilon_{zz} + \epsilon_{yy}$,双轴应变表示为 $\epsilon_{bi} = 2\epsilon_{zz} - (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})$,但文献中描述载流子限制势受应变的影响时,为了方便通常用双轴应变的一半表征双轴应变,我们也采用这种方式.

3.1. 横向周期对应变场分布的影响

为了定量分析横向周期对应变分布的影响,图 4 给出了单层量子点模型不同横向周期对各个应变分量的影响程度,其中 d 表示周期大小.在量子点内部, ϵ_{xx} , ϵ_{zz} 和双轴应变的绝对值随横向周期的减小而增大,因此横向周期对量子点应变的影响是使应变分量变大,量子点外部应变变化情况与量子点

内部相反.无论横向周期如何变化,对于流体静应变几乎没有影响,在量子点内部流体静应变为压缩应变,其值为常数,在量子点外部流体静应变为零.受横向周期影响较大的是双轴应变和 ϵ_{zz} 应变分量. ϵ_{xx} , ϵ_{zz} 和双轴应变分量在量子点内部表现为线性变化,在量子点外部呈现双曲线或抛物线变化趋势,并且在远离量子点时趋近于零,总的变化趋势不受横向周期变化的影响,以上讨论与“Inclusion”理论计算得到的解析结果结论一致^[19].双轴应变改变了量子点内载流子的限制势,因此计算量子点材料的电子结构和光学特性时必须考虑材料的横向周期对载流子应变限制势的影响.

3.2. 纵向周期对应变场分布的影响

比较图 5 中各应变分量在不同纵向周期条件下的分布可以看出,当纵向周期比较小时,不同层之间应变分量的差异比较大(流体静应变除外). ϵ_{xx} 应变分量从上到下沿量子点中心轴路径呈上凸趋势,中间层量子点内部应变为压缩应变,因此其绝对值下降. ϵ_{zz} 和 ϵ_{bi} 与 ϵ_{xx} 变化情况正好相反,沿中心轴路径的应变曲线呈下凹趋势,因此在纵向周期比较小的情况下,量子点内部的应变由张应变转变为压缩应

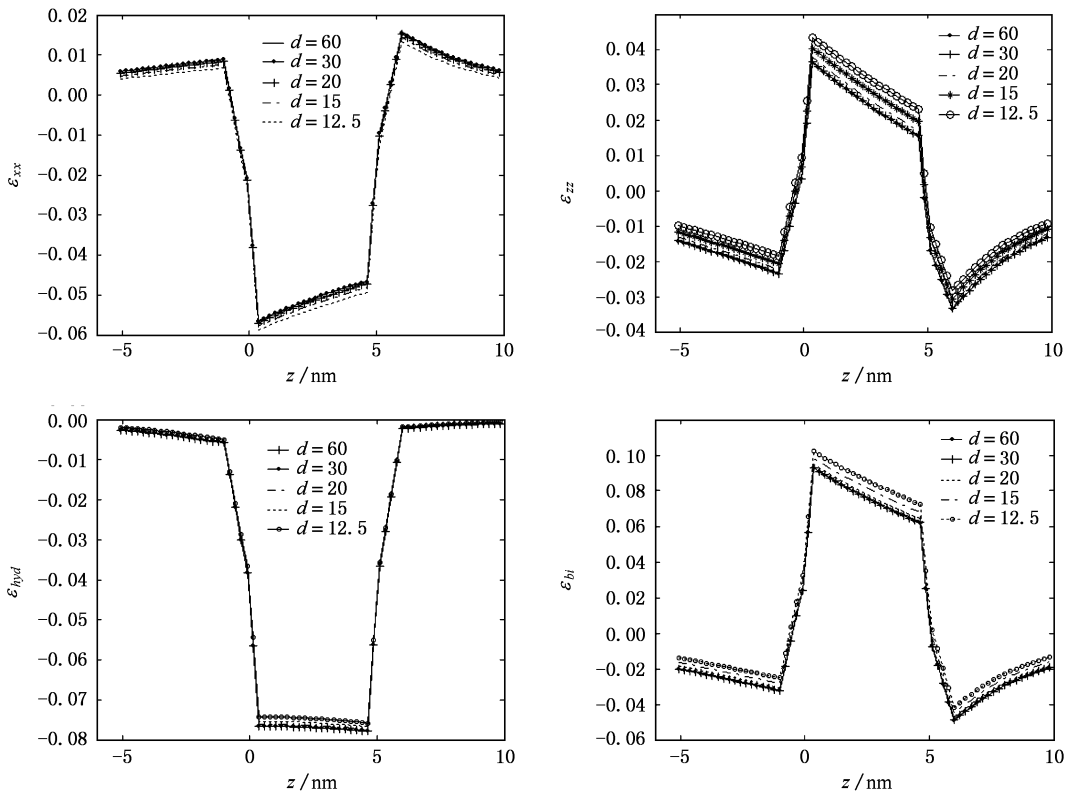


图 4 单层量子点在不同横向周期分布情况下,中心量子点沿中心轴路径各个应变分量的应变场分布比较

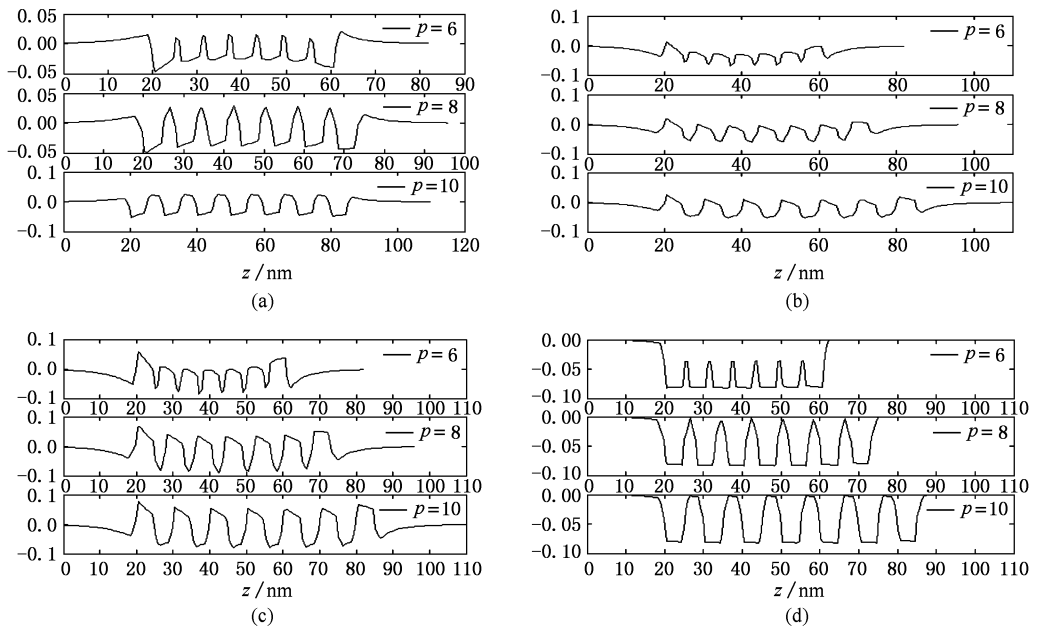


图5 不同纵向周期条件下单列七层量子点模型沿中心轴路径各个应变分量比较 (a) ϵ_{xx} 应变 (b) ϵ_{zz} 应变, (c) ϵ_{ij} 双轴应变 (d) ϵ_{hyd} 流体静应变

变如图5(b)(c)所示,其应变绝对值随纵向周期的减小先减小后增大.从图5(a)(b)和(c)还可以看出,上三层量子点和下三层量子点的应变分布近似对称,但在上三层量子点内部的应变近似为常数,

变化很小,而下三层量子点内部的应变相对要大,这一结果与量子点的形状以及对衬底施加的边界条件有关.与横向周期对量子点应变场的影响一样,流体静应变分量几乎不受影响,如图5(d)所示.综合图5

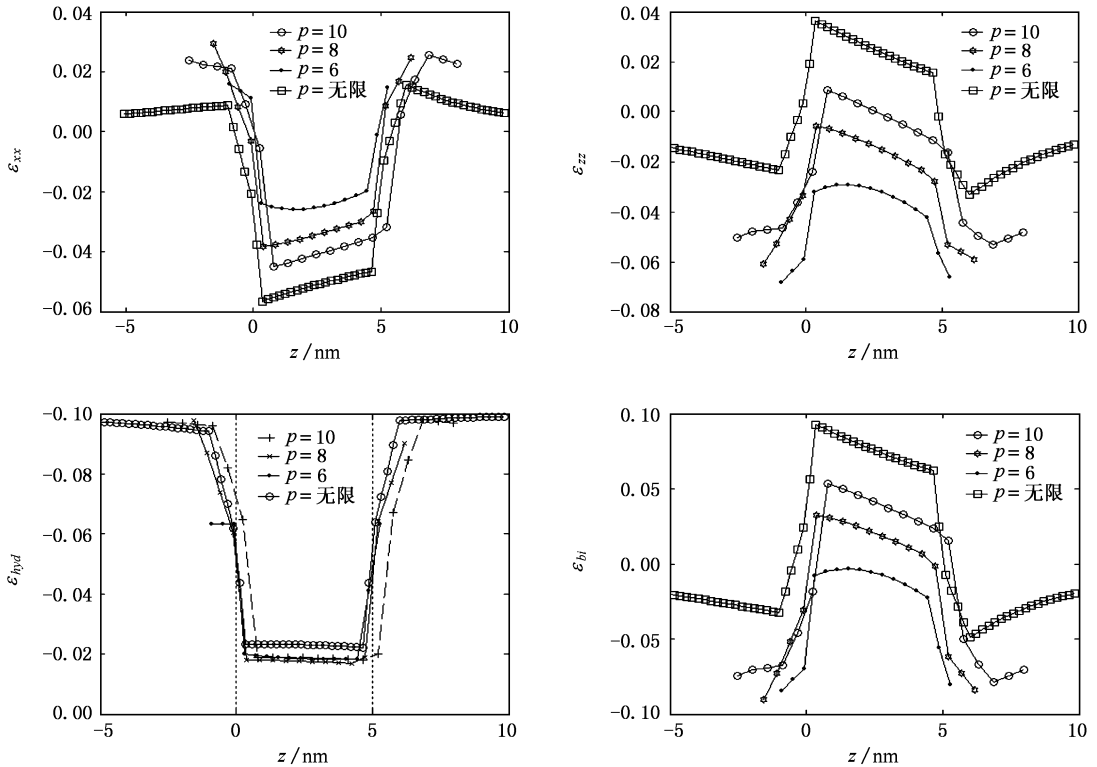


图6 单列量子点模型的中心量子点沿中心轴路径在不同纵向周期条件下的各个应变分量的分布比较

可以看出,纵向周期对量子点的应变场影响十分明显,且对中心量子点的影响最大.我们提取了中间量子点在不同纵向周期情况的应变分布并与孤立量子点情况进行了比较,如图6,可以看出从最小纵向周期到无穷大纵向周期,应变场分布受到影响的趋势是一致的. Pearson 等利用解析连续性方法讨论了金字塔形量子点的应变分布^[19],其结果与我们计算的不同之处在于量子点的几何形状不同,将该文献中图4的结果与我们计算的图6(a)比较可以看出两者基本一致,验证了我们计算结果的正确性.

3.3. 多层多列超晶格之间相互作用的影响

图7给出了孤立、单层、单列和超晶格量子点模

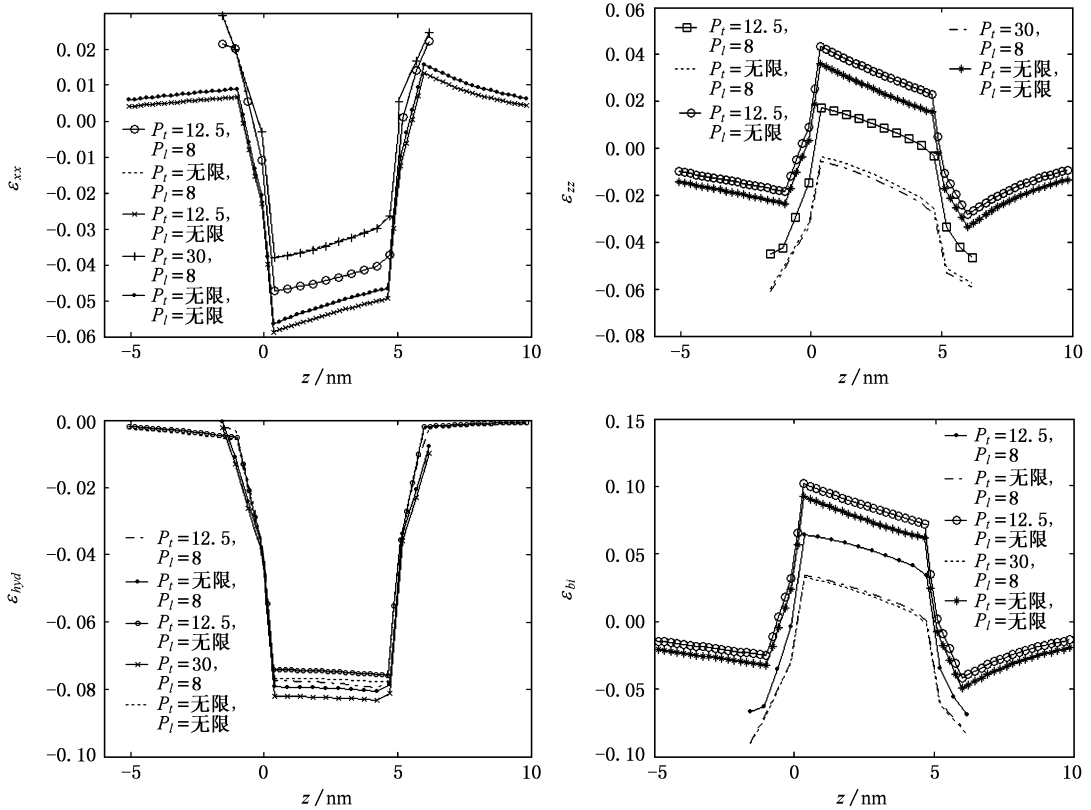


图7 孤立、单层、单列和超晶格模型中心量子点沿中心轴路径各个应变场分布比较

4. 结 论

基于 InAs/GaAs 透镜形自组织量子点材料,系统地讨论了孤立、单层、单列和超晶格量子点的相互作用对量子点应变场分布的影响.已发表的文献大多只讨论单个孤立量子点应变场的分布,文献[16]讨论了单列量子点纵向周期对应变场分布的影响,

型中心量子点的各个应变分量在中心轴路径的分布,其中 P_l 表示横向量子点周期, P_z 表示纵向周期. $P_l = \infty$ 表示单列量子点, $P_z = \infty$ 表示单层量子点,当 P_l 和 P_z 都等于 ∞ 时表示孤立量子点系统.在 3.1 和 3.2 的讨论中已经表明横向周期和纵向周期对量子点应变场分布的影响恰好相反,比较图7中各个分量进一步可以看出,由于纵向和横向量子点间的相互作用使得对中心量子点应变场影响的效果部分抵消,在量子点内部,超晶格量子点的应变分布与孤立量子点系统几乎一致.纵横周期作用对应变场影响的抵消程度取决于纵向和横向周期的大小.

以及由此引起的量子点应变限制势的改变.作为理想模型的单列量子点,无论是器件制备或实际应用是不可能存在的.有实际应用意义的讨论是单层量子点和多层量子点超晶格材料,但单独讨论纵向周期对应变场分布的影响,有利于把握量子点应变场分布影响的各个因素.通过四种量子点物理模型的数值计算,得出以下结论:纵向周期和横向周期对量子点应变场分布的影响效果相反,对于超晶格量子

点材料,纵向周期对量子点应变场的影响可以在一定程度上与横向周期对量子点应变场分布的影响抵消,调节合适的纵向和横向量子点间距,可以使量子点超晶格系统空间周期性分布应变场接近于孤立量子点的应变场分布.因此在讨论量子点材料的应变

限制势对量子点电子结构和发光频谱的影响时,必须针对不同的物理模型将周期相互作用综合考虑,在理论分析与材料制备的各方面,在一定的条件下可以将孤立量子点作为简化模型^[10-12].

- [1] Chang J F 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 978 (in Chinese) [常加峰 2004 物理学报 **53** 978]
- [2] Yu Z Y , Wei Y Q 2005 *Journal of Material Science and Technology* **21** 559
- [3] Xin G F , Chen G Y , Hua J Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1643 (in Chinese) [辛国锋、陈国鹰、花吉珍 2004 物理学报 **53** 1643]
- [4] Lu F L , Chen C Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1652 (in Chinese) [陆法林、陈昌远 2004 物理学报 **53** 1652]
- [5] Wang Z G 2002 *J. Synthetic Crystals* . **31** 208 (in Chinese) [王占国 2002 人工晶体学报 **31** 208]
- [6] Yu W B , Madhukar 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 905
- [7] Andreev A D , O'Reilly E P 2000 *Phys. Rev. B* **62** 15851
- [8] Grundmann M , Stier O , Bimberg D 1995 *Phys. Rev. B* **52** 11969
- [9] Andreev A D , O'Reilly E P 1997 *Phys. Rev. B* **62** 15851
- [10] Grundmann M , Stier O , Bimberg D 1995 *Phys. Rev. B* **52** 11969
- [11] Carlson A *et al* 1998 *Surface Sci.* **406** 48
- [12] Liu Y M , Yu Z Y , Yang H B , Huang Y Z 2005 *Chinese Journal of Semiconductors* **26** 1317
- [13] Li S S , Bai X J 1997 *Phys. Rev. B* **55** 15434
- [14] Li S S , Bai X J , Yuan Z L *et al* 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11575
- [15] Li S S , Chang K , Xia J B 2005 *Phys. Rev. B* **71** 155301
- [16] Benabbas T , Androussi Y , Lefebvre A 1999 *J. App. Phys.* **86** 1945
- [17] Yang G T , *Elastic Mechanics* 1997 (Higher Education Press p57) (in Chinese) [杨桂通 1997 弹性力学 (高等教育出版社) 第 57 页]
- [18] Benabbas T , Androussi Y , Lefebvre A 1999 *J. App. Phys.* **86** 1945
- [19] Pearson G S , Fauxa D A 2000 *J. App. Phys.* **88** 730
- [20] Stoleru V G *et al* 2002 *Physica E* **15** 131

Effect of the longitudinal and transverse stacking period of InAs/GaAs quantum dots on the distribution of strain field

Liu Yu-Min^{1,2†} Yu Zhong-Yuan^{1,2} Yang Hong-Bo^{1,2} Huang Yong-Zhen³

¹ School of Science , Beijing University of Posts & Telecommunications , Beijing 100876 , China)

² Key Laboratory of optical communication and lightwave technologies ministry of education , Beijing 100876 , China)

³ State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics , Institute of Semiconductors , Chinese Academy of Science , Beijing 100083 , China)

(Received 7 November 2005 ; revised manuscript received 23 November 2005)

Abstract

A systematic investigation is made on the influence of the longitudinal and transverse period distributions of quantum dots on the elastic strain field. The results showed that the effects of the longitudinal period and transverse period on the strain field are just opposite along the direction of center-axis of the quantum dots , and under proper conditions , both effects can be eliminated. The results demonstrate that in calculating the effect of the strain field on the electronic structure , one must take into account the quantum dots period distribution , and it is inadequate to use the isolated quantum dot model in simulating the strain field.

Keywords : strain , semiconductor quantum dot , self-organization

PACC : 0365 , 2110D

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2003CB314901) , the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2003AA311070) and the Open Project of the State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics.

† E-mail : liuyuminhq@263.net