

01;06

Зависимость среднего размера квантовых точек от времени на кинетической стадии роста

© В.Г. Дубровский, Н.В. Сибирев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

E-mail: v_dubr@mail.ru

Институт аналитического приборостроения РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 22 сентября 2004 г.

Теоретически исследуется процесс формирования квантовых точек в гетероэпитаксиальных системах, рассогласованных по параметру решетки. Получено и проанализировано аналитическое решение, описывающее эволюцию от времени среднего размера квантовых точек на кинетической стадии роста.

Процессы спонтанного формирования когерентных наноразмерных островков в гетероэпитаксиальных системах, рассогласованных по параметру решетки, широко используются для создания ансамблей квантовых точек (КТ), в которых наблюдаются эффекты трехмерного квантования [1]. В настоящей работе продолжены теоретические исследования кинетики формирования КТ в рассогласованных гетероэпитаксиальных системах, начатые в работах [2–5]. Целью работы является получение теоретической зависимости среднего размера островков от времени на кинетической стадии роста. Поскольку электрические и оптические свойства ансамблей островков во многом определяются размером островков, данная задача актуальна для создания ансамблей КТ с заранее заданными структурными свойствами [1].

В работах [2–4] было получено следующее кинетическое уравнение на средний латеральный размер КТ на стадии релаксации островков по размерам:

$$\begin{cases} \tau \frac{dz}{dt} + \frac{l_0^2 N}{h_{eq}} z^{3/2} = \Phi(t), \\ z(t_*) = 0. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь N — поверхностная плотность островков по окончании стадии нуклеации, l_0 — среднее расстояние между атомами на поверхности,

$\Phi(t) = H(t)/h_{eq} - 1$ — идеальная метастабильности системы, $H(t)$ — эффективная толщина осажденного материала в момент времени t , h_{eq} — равновесная толщина смачивающего слоя (СС) [6], τ — характерное время поступления атомов из СС в островки. Функция $z(t)$ определяется согласно $z(t) = (L_*(t)/\alpha l_0)^2$, где $L_*(t)$ есть максимально представительный („средний“) латеральный размер островков, возникших в момент времени t_* , соответствующий наибольшей толщине СС, $\alpha = (6d_0 \text{ctg } \theta/l_0)^{1/3}$, θ — контактный угол боковой грани островка, d_0 — высота монослоя.

Следуя [4], перейдем к безразмерному размеру $l(t) \equiv L_*(t)/L$ и времени $t \rightarrow t/t_R$, где L_R — характерный латеральный размер островков по окончании стадии релаксации по размерам и t_R — характерное время релаксации по размерам. Для t_R и L_R из результатов работы [4] следуют выражения

$$t_R = \frac{2}{3} \tau \frac{1}{\Phi_0^{1/3}} \left(\frac{h_{eq}}{l_0^2 N} \right)^{2/3}, \quad (2)$$

$$L_R = \left(\frac{6d_0(H_0 - h_{eq})}{N} \text{ctg } \theta \right)^{1/3}. \quad (3)$$

Здесь $\Phi_0 = H_0/h_{eq} - 1$ есть идеальная метастабильность после прекращения осаждения, H_0 — эффективная толщина осажденного слоя с КТ. В случае молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) при постоянной скорости осаждения V $\Phi(t)$ содержит два характерных времени: время $t_{eq} = h_{eq}/V$, требующееся для формирования СС равновесной толщины, и время t_0 , соответствующее прекращению осаждения [2]. При этом, как функция времени, $\Phi(t) = V(t - t_{eq})/h_{eq}$ при $t < t_0$ и $\Phi = V(t_0 - t_{eq})/h_{eq} = \Phi_0$ при $t > t_0$.

Введя обозначение $\varphi^3(t) \equiv \frac{\Phi(t)}{\Phi_0}$, уравнение (2) можно записать в виде

$$\begin{cases} 3l \frac{dl}{dt} + l^3 = \varphi^3(t), \\ l(t_*) = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Физический смысл уравнения (4) следующий: при $\varphi = \text{const}$ оно описывает эволюцию во времени среднего размера КТ при постоянном количестве осажденного материала, а медленная (в сравнении с временем изменения размера островков) зависимость φ от времени учитывает изменение общего количества осажденного материала за счет адсорбции. При этом мы считаем, что эффективная толщина H_0

не намного превосходит критическую толщину перехода от двумерного к трехмерному росту, что типично для выращивания когерентных островков. Поэтому средний размер стабилизируется на значении, соответствующем H_0 , при этом метастабильность системы стремится к нулю и вторичного зарождения островков [7] не происходит.

Если $\varphi(t)$ не зависит от времени, то точное решение (4), полученное в [4], имеет вид: $l = \varphi\lambda(\varphi\tau)$, где функция $\lambda(t)$ определяется обращением выражения

$$t - t_* = \ln\left(\frac{\sqrt{1 + \lambda + \lambda^2}}{1 - \lambda}\right) - \sqrt{3} \operatorname{arctg}\left(\frac{2\lambda + 1}{\sqrt{3}}\right) + \frac{\pi}{2\sqrt{3}}. \quad (5)$$

При решении задачи (4) мы будем использовать условие

$$\varepsilon = \frac{t_R}{3(t_0 - t_{eq})} \ll 1. \quad (6)$$

Малость ε обеспечивается наличием иерархии временных масштабов различных стадий нуклеации островков [2–4]. Условие (6) физически означает, что релаксация островков по размерам — более быстро протекающий процесс, чем осаждение слоя материала эффективной толщины H_0 . Сделав замену $f(\varepsilon t) = \varphi(t)$, убеждаемся, что сама функция f и ее производная по времени являются величинами одного порядка. Решение (4) будем искать в виде асимптотического ряда

$$l(t) = \lambda[f(\varepsilon t)t](f(\varepsilon t) + \delta(t)),$$

$$\delta(t) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \varepsilon^k \delta_k(t). \quad (7)$$

Подставив этот ряд в уравнение (4) и воспользовавшись тем, что $3\lambda\lambda'f^3 + \lambda^3f^3 = f^3$ и $3\lambda\lambda' = 1 - \lambda^3$, получим дифференциальное уравнение на $\delta(t)$. Приравнявая в нем слагаемые с одинаковыми степенями по ε , получим

$$\delta_k'(t) + g(t)\delta_k(t) + h_k(t) = 0,$$

$$\delta_k(0) = 0. \quad (8)$$

Здесь

$$g(t) = \frac{2 + \lambda^3[\varphi(t)t]}{3\lambda^2[\varphi(t)t]} \varphi(t), \quad (9)$$

$$h_1(t) = \left(1 + \frac{(1 - \lambda^3[\varphi(t)t])t\varphi(t)}{3\lambda^2[\varphi(t)t]}\right) f'(\varepsilon t) \quad (10)$$

и остальные $h_k(t)$ также легко находятся. Каждое из линейных уравнений (10) имеет решение

$$\delta_k(t) = \int_0^t dt' h_k(t') \exp\left(-\int_{t'}^t g(t'') dt''\right). \quad (11)$$

Уже первое приближение

$$l_1(t) = \lambda[f(\varepsilon t)t] (f(\varepsilon t) + \delta_1(t)) \quad (12)$$

является существенно более точным приближением истинного решения, чем найденное в [4] решение $\lambda(t)$. На рис. 1 приведены результаты численного исследования уравнений (5), (6) и (12) в типичном для МПЭ случае, когда вещество осаждается с постоянной скоростью при

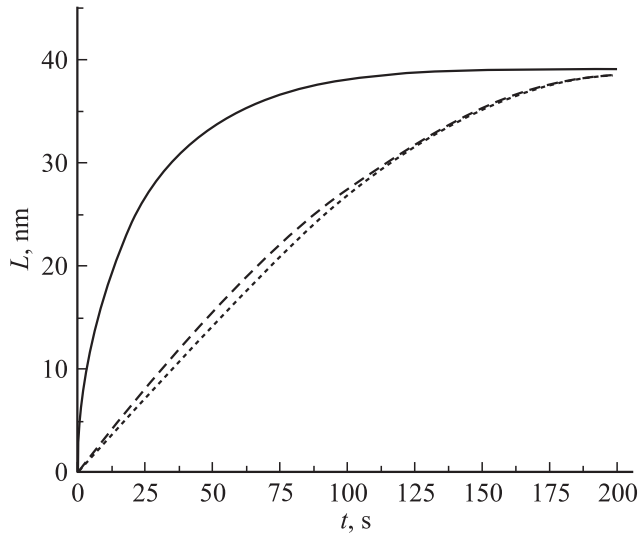


Рис. 1. Результаты численного исследования уравнений (4), (5) и (12) для параметров системы Ge/Si(100) [2]: $d_0 = 0.145$ nm, $h_{eq} = 2.6$ МС, $\theta = 20^\circ$, $N = 2 \cdot 10^{10}$ см $^{-2}$, $\tau = 0.0296$ s, $l_0 = 0.395$ nm, $\varepsilon = 0.07$. Эффективная толщина осажденного Ge $H_0 = 7.1$ МС, скорость осаждения Ge $M = 0.03$ МС/с. Сплошная линия — решение (5), штрихованная — численное решение уравнения (4), пунктирная — приближенное решение (12).

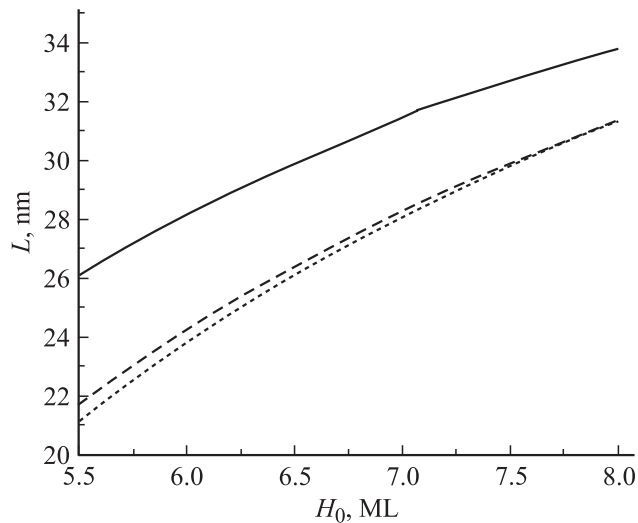


Рис. 2. Сравнение результатов численного моделирования уравнений (4), (5) и (12) для системы Ge/Si(100) к моменту прекращения напыления. В расчете эффективная толщина H_0 менялась от 5.5 до 8 МС. Предполагалось, что $h_{eq} = 2.6$ МС, $\theta = 20^\circ$, $N = 2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Сплошная линия — решение (5), штрихованная — численное решение уравнения (4), пунктирная — приближенное решение (12).

постоянной температуре поверхности. Как видно из представленных графиков, решение (12) достаточно хорошо аппроксимирует точное. В то же время полученное ранее решение (6) дает явно завышенное значение среднего размера КТ для всех значений времен, причем при некоторых t оно может превосходить истинное более чем в два раза. Полученное решение (12), таким образом, дает более плавное изменение среднего размера от времени на кинетической стадии роста. На рис. 2 приведено сравнение результатов численного моделирования уравнений (5), (6) и (12) для процесса формирования „hut“ кластеров в системе Ge/Si(100) [4] к моменту прекращения напыления в зависимости от эффективной толщины осажденного Ge.

Таким образом, в работе построено аналитическое решение уравнения на средний размер КТ, которое хорошо приближает истинное

решение. Изложенные результаты могут применяться для исследования процессов формирования КТ в гетероэпитаксиальных системах InAs/GaAs, Ge/Si и т.д. и позволяют точно предсказать значение среднего размера КТ при данных эффективной толщине осаждения и времени экспозиции образца.

Список литературы

- [1] *Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N.N.* Quantum dot heterostructures. Chichester: Wiley&Sons, 1999.
- [2] *Dubrovskii V.G., Cirlin G.E., Musikhin Yu.G., Samsonenko Yu.B., Tonkikh A.A., Polyakov N.K., Egorov V.A., Tsatsul'nikov A.F., Krizhanovskaya N.A., Ustinov V.M., Werner P.* // J. Cryst. Growth. 2004. V. 267. P. 47.
- [3] *Дубровский В.Г., Мусихин Ю.Г., Цырлин Г.Э., Егоров В.А., Поляков Н.К., Самсоненко Ю.Б., Тонких А.А., Крыжановская Н.В., Берт Н.А., Устинов В.М.* // ФТП. 2004. Т. 38. С. 342.
- [4] *Dubrovskii V.G., Cirlin G.E., Ustinov V.M.* // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 075 409.
- [5] *Osipov A.V., Schmitt F., Kukushkin S.A., Hess P.* // Appl. Surf. Sci. 2002. V. 188. P. 156.
- [6] *Müller P., Kern R.* // Appl. Surf. Sci. 1996. V. 102. P. 6.
- [7] *Osipov A.V., Kukushkin S.A., Schmitt F., Hess P.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 205 421.