*05;06*

# Введение феноменологического параметра релаксации напряжений, вызванных несоответствием постоянных решетки на гетерогранице

© *О.В. Константинов, Е.Ю. Котельников, А.В. Матвеенцев, А.Е. Романов*

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

*Поступило в Редакцию 7 марта 2001 г.*

Получена аналитическая формула, описывающая увеличение ширины запрещенной зоны в квантовом кластере, который рассматривается как включение простейшей формы (сферической или плоской) при произвольной величине параметра несоответствия постоянных решеток кластера и окружающей его матрицы. Введена феноменологическая связь этого параметра с параметром релаксации напряженной границы, который рассматривается, как подгоночный. Показано, что релаксация мала или, по-видимому, вовсе отсутствует в случае квантовой ямы и проявляется в полной мере в случае квантовой точки.

Хорошо известно, что деформация полупроводника вызывает существенные изменения в его энергетическом спектре, в частности увеличение ширины его запрещенной зоны. Этот эффект определяется в основном дилатацией, т.е. изменением объема кристалла, которое обусловлено деформацией. Дилатация связана с давлением, равным одной трети шпура тензора напряжений. Зависимость ширины запрещенной зоны от давления уже давно изучалась в физике полупроводников [1]. Особую актуальность этот вопрос приобрел в теории квантовых кластеров в полупроводниках, таких как квантовые ямы и квантовые точки. Благодаря разнице постоянных решетки кластера и окружающей матрицы, давление внутри кластера может быть весьма значительным, что будет сильно влиять на спектр уровней в кластере. Вопросам расчета упругих полей напряжений в квантовых точках посвящены работы [2,3]. В этих работах, при всей изощренности расчетных методик, содержится довольно значительная неопределенность результатов. Она связана с тем, что при задании несоответствия параметров кристаллических решеток на границах кластера делается предположение о том, что никакой релаксации поля напряжений на границах не происходит. Это предположение не согласуется с наблюдаемым спектром рекомбинационного излучения квантовых ям из InAs, находящихся в матрице GaAs.

В настоящей работе предложен способ введения феноменологического параметра релаксации поля напряжений на границах кластера. В совокупности с простой моделью кластера, также предлагаемой в настоящей работе, и простой теорией спектров электронных состояний, данной в нашей предыдущей работе [4], это позволит, как мы надеемся, находить величину параметра релаксации поля напряжений на границах кластеров по спектрам рекомбинационного излучения из кластеров.

***Давление в кластере***. Квантовые ямы, содержащие узкозонный материал, обычно имеют постоянную решетки виртуального кристалла больше, чем у окружающей матрицы. Благодаря этому материал квантовой ямы испытывает сжатие. Оно должно было бы быть особенно сильным в случае квантовой точки, зачастую состоящей из чистого узкозонного материала. При этом разность постоянных решетки кластера и матрицы $\Delta a$ будет максимальной. Сжатие вызывает увеличение ширины запрещенной зоны материала кластера (квантовой ямы или квантовой точки) благодаря давлению внутри его. Согласно известным экспериментальным данным, подытоженным в монографии [1], зависимость ширины запрещенной зоны от давления для большинства полупроводников $A_3B_5$ является нарастающей функцией и при давлениях, меньших 20 килобар, крутизна нарастания $K$ будет:

$$K = 12\,\mathrm{meV/kbar}. \tag{1}$$

Если выразить давление $p$ в гигапаскалях, то этому же соотношению можно придать вид

$$\delta E_G = 0.12 \cdot p, \ \mathrm{eV}. \tag{2}$$

Здесь $\delta E_G$ — барическое увеличение ширины запрещенной зоны в электрон-вольтах. Ниже будет показано (как для сферической геометрии квантовой точки, так и для плоской геометрии квантовой ямы), что давление в обоих случаях связано одинаковым соотношением с относительной величиной параметра эффективного рассогласования постоянных решетки $f$:

$$p = \frac{2}{3}\,\frac{E}{1-\nu}\, f, \tag{3}$$

где $E$ — модуль Юнга (в гигапаскалях), $\nu$ — коэффициент Пуассона.

Подставляя (3) в (2), получим соотношение, связывающее увеличение ширины запрещенной зоны с параметром рассогласования $f$:

$$\delta E_G = 0.08\,\frac{E}{1-\nu}\,f,\ \text{eV}. \tag{4}$$

Введем теперь новый феноменологический параметр — параметр релаксации.

Для этого представим параметр рассогласования $f$ в следующем виде:

$$f = \frac{\Delta a}{a}\,x\,(1-\rho). \tag{5}$$

Здесь $a$ — постоянная решетки матрицы, $\Delta a$ — разность постоянных решеток чистого узкозонного материала и материала матрицы. Обычно широкозонная матрица имеет меньшую постоянную решетки, чем узкозонный кластер, поэтому кластер оказывается сжатым, т.е. $\Delta a$ — положительная величина; $x$ — доля чистого узкозонного материала в твердом растворе материала кластера (квантовой ямы или квантовой точки). Параметр релаксации гетерограницы кластер–матрица $\rho$ является при нашем подходе неизвестной варьируемой величиной. Если граница напряжена и на ней отсутствуют дислокации несоответствия, то $\rho = 0$. Если же напряжений на границе нет (произошла их релаксация), то $\rho = 1$. При этом параметр рассогласования $f$ равен нулю. Будем рассматривать для определенности кластер с составом твердого раствора $\mathrm{In}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}$. Тогда имеем величины $\Delta a = 4 \cdot 10^{-9}$ cm, $a = 5.7 \cdot 10^{-8}$ cm:

$$\frac{\Delta a}{a} = 0.07. \tag{6}$$

Таким образом, параметр рассогласования $f$ принимает форму

$$f = 0.07\,x\,(1-\rho). \tag{7}$$

Для полупроводников на основе InAs мы принимаем $E = 50\,\text{GPa}$, $\nu = 1/3$ [2]. Оба последних равенства — приближенные, с точностью примерно 10%. Тогда формула (3) принимает вид

$$p = 3.5\,x\,(1-\rho). \tag{8}$$

Подставляя (8) в (4), получим формулу для увеличения ширины запрещенной зоны, из которой исключено давление:

$$\delta E_g = 0.42\,x\,(1-\rho),\ \text{eV}. \tag{9}$$

Обсудим величину параметра релаксации гетерограницы кластер–матрица $\rho$. В случае квантовой ямы гетерограница является плоской, а рассогласование постоянных решеток относительно невелико, поэтому естественно предположить, что релаксация отсутствует, т.е. $\rho = 0$. Рассмотрим тот пример, который изучался в нашей работе [4], а именно квантовую яму состава $\mathrm{In_{0.2}Ga_{0.8}As}$ $(x = 0.2)$. Очевидно, что в этом случае $\delta E_g = 0.08$ eV. Мы вычисляем все энергии с точностью до 0.01 eV, поскольку более высокая точность не достижима из-за того, что нам доподлинно не известен параметр релаксации гетерограницы $\rho$. Увеличение ширины запрещенной зоны внутри квантовой точки из InAs окажется в пять раз больше и составит громадную величину 0.40 eV, которая превосходит исходную ширину запрещенной зоны, равную 0.35 eV. Отметим, что электронный уровень в такой квантовой точке не будет существовать, что противоречит опыту. Отсюда следует, что на границе кластера, представляющего собой квантовую точку, не возникает псевдоморфного (т.е. напряженного и бездислокационного) состояния. Возможно, это связано с условиями роста пирамиды квантовой точки InAs, которая располагается своим широким основанием на смачивающем слое InAs. По мере заращивания смачивающего слоя арсенидом галлия происходит постепенное затопление пирамиды арсенидом галлия. Для этих условий довольно естественно предположить отсутствие возникновения растянутого кристалла GaAs, охватывающего пирамиду. Заметим, что строго доказать справедливость условия $f = 0$ на границе кластера мы не имеем возможности, по существу это лишь простейшее предположение. Поэтому предлагаемые здесь расчеты имеют, скорее, иллюстративный характер и численные результаты не претендуют на безусловную однозначность. Тем не менее предлагаемая теория весьма проста и расчеты могут быть с легкостью проделаны заново, если появятся экспериментальные данные, дающие основания для выбора параметра релаксации. Окончательный результат для ширины запрещенной зоны внутри кластера дается формулой (10) и каким-либо эмпирическим выражением для ширины запрещенной зоны безграничного твердого раствора $E_G^X$. Например, для $\mathrm{In}_x\mathrm{Ga}_{1-x}\mathrm{As}$ такая формула имеет вид [5]

$$E_G^{(X)} = 1.43 - 1.48x + 0.41x^2. \tag{10}$$

Тогда ширина запрещенной зоны внутри кластера будет

$$E_G = 1.43 - 1.06x - 0.42x\rho + 0.41x^2. \tag{11}$$

Сравним результат вычисления $E_G$ в случае квантовой ямы по этой формуле ($E_G = 1.23\,\text{eV}$) с тем значением, которое было принято в нашей работе [4], а именно $E_G = 1.21\,\text{eV}$. Можно было бы пренебречь различием в 0.02 eV, однако если попытаться устранить его с помощью параметра $\rho$, то тогда следует положить $\rho = 0.25$, что также представляется разумным.

Дадим далее вывод формулы (3) для давления внутри кластеров простейших форм — сферической и плоской.

***Упругие поля для сферической модели квантовой точки***. Пусть кристаллические решетки квантовой структуры и окружающей матрицы характеризуются параметрами $a_1$ и $a_2$ соответственно. В рамках линейной теории упругие поля, возникающие из-за рассогласования $\Delta a = a_1 - a_2$, будут пропорциональны параметру несоответствия $f = \Delta a / a_1$.

Сферическая квантовая точка, имеющая радиус $R_0$, может быть представлена упругим дилатационным включением. В этом случае полагают [7,8], что упругий шар радиусом $R_0$ вставлен в сферическую полость, объем которой меньше объема включения на $\Delta V$. В силу симметрии поле перемещений как внутри шара $\mathbf{u}^{(1)}$, так и вне $\mathbf{u}^{(2)}$ имеет только радиальную компоненту, которая зависит только от радиальной координаты $r$ [7]:

$$u_r^{(1)} = -\frac{2(1-2\nu)}{(1+\nu)} \frac{C}{R_0^3} r, \tag{12}$$

$$u_r^{(2)} = \frac{C}{r^2}, \tag{13}$$

где $\nu$ — коэффициент Пуассона. При этом упругие модули квантовой точки и окружающей матрицы считаются равными. Постоянная $C$ определяется из граничного условия:

$$4\pi R_0^2 \left(u_r^{(2)} - u_r^{(1)}\right)\Big|_{r=R_0} = \Delta V \tag{14}$$

и оказывается равной:

$$C = \frac{1+\nu}{12\pi(1-\nu)} \Delta V, \quad \text{или иначе} \quad C = \frac{1+\nu}{3(1-\nu)} R_0^3 f. \tag{15}$$

Во втором равенстве учтено, что изменение объема $\Delta V$ связано с параметром несоответствия $f$ соотношением:

$$\Delta V = 4\pi R_0^3 f, \quad \text{или} \quad \Delta V/V = 3f. \tag{16}$$

Поле перемещений (11) и (12) определяет следующие компоненты тензора деформаций (заданные в сферической системе координат):

$$\varepsilon_{rr}^{(1)} = \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)} = -\frac{2(1-2\nu)}{3(1-\nu)}\, f, \tag{17}$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)} = -\frac{2(1+\nu)}{3(1-\nu)}\frac{R_0^3}{r^3}\, f, \quad \varepsilon_{\phi\phi} = \varepsilon_{\theta\theta} = \frac{1+\nu}{3(1-\nu)}\frac{R_0^3}{r^3}\, f. \tag{18}$$

Очевидно, что дилатация

$$\delta = \sum_k \varepsilon_{kk}$$

внутри квантовой точки постоянна и равна:

$$\delta^{(1)} = -\frac{2(1-2\nu)}{1-\nu}\, f, \tag{19}$$

а вне точки вообще отсутствует:

$$\delta^{(2)} = 0. \tag{20}$$

Поле упругих напряжений находим из (17), (18) и закона Гука:

$$\sigma_{rr}^{(1)} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(1)} = \sigma_{\theta\theta}^{(1)} = -\frac{2E}{3(1-\nu)}\, f, \tag{21}$$

$$\sigma_{rr}^{(2)} = -\frac{2E}{3(1-\nu)}\, f; \quad \sigma_{\varphi\varphi}^{(2)} = \sigma_{\theta\theta}^{(2)} = -\frac{1}{2}\,\sigma_{rr}^{(2)}, \tag{22}$$

где $E$ — модуль Юнга. Соответственно давление

$$p = \frac{1}{3}\sum_k \sigma_{kk}$$

внутри точки описывается формулой (3), а вне точки равно нулю.

***Упругие поля для плоской модели квантовой ямы***. Выберем декартову систему координат так, чтобы ось $y$ была перпендикулярна поверхностям, ограничивающим яму. Оси $x$ и $z$ параллельны этим поверхностям, а также кристаллографическим направлениям, вдоль которых задано несоответствие $f$. Вне ямы упругие деформации и напряжения отсутствуют. Внутри ямы они задаются следующими соотношениями:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{zz} = -f, \qquad \varepsilon_{yy} = \frac{2\nu}{1-\nu} f, \tag{23}$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{zz} = -\frac{E}{1-\nu} f, \qquad \sigma_{yy} = 0. \tag{24}$$

Соответственно дилатация внутри ямы оказывается следующей:

$$\delta = -\frac{2(1-2\nu)}{1-\nu} f. \tag{25}$$

Итак, мы доказали, что давление внутри сжатой квантовой ямы или квантовой точки описывается одним и тем же выражением (3).

## Список литературы


[1] *Смит Р.* Полупроводники. М.: Мир, 1982.
[2] *Benabbas T., Androussi Y., Lefebvre A.* // Journal of Appl. Phys. 1999. V. 86. N 4. P. 1945–1950.
[3] *Andreev A.D., Downes J.R., Faux D.A., O'Reily E.P.* // Journal of Appl. Phys. 1999. V. 86. N 1. P. 287–305.
[4] *Евтихиев В.П., Константинов О.В., Матвеенцев А.В.* // Письма в ЖТФ. 2001. Т. 27. В. 6. С. 65–69.
[5] *Landolt-Bornstein.* New Series III/22a.
[6] *Эшелби Дж.* Континуальная теория дислокаций. М.: Иностр. лит., 1963.
[7] *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985.