

06;11

## Исследование квантовых точек InAs на вицинальной поверхности кристалла GaAs методом атомно-силовой микроскопии

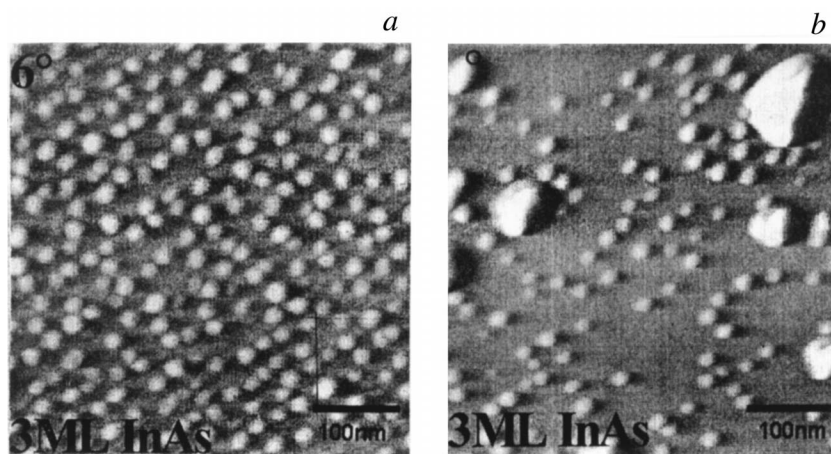
© В.П. Евтихийев, О.В. Константинов, Е.Ю. Котельников,  
А.В. Матвеевцев, А.Н. Титков, А.С. Школьник

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

Поступило в Редакцию 2 октября 2001 г.

Предложена методика обработки изображений, полученных путем атомно-силовой микроскопии. На конкретном примере показано, как определяются параметры кластеров InAs на вицинальной поверхности кристалла GaAs. При использовании развитой ранее сферической модели кластера это дает возможность рассчитать энергетические уровни электронов и дырок в квантовой точке.

**Введение.** В литературе неоднократно обсуждались свойства массивов квантовых точек InAs, которые образуются при молекулярно-лучевой эпитаксии на поверхности GaAs в результате самоорганизации [1]. Обычно для этого используется поверхность кристалла GaAs, которая является вицинальной плоскостью [2]. Последняя представляет собой плоскость, наклоненную под малым углом (например,  $6^\circ$ ) к плоскости (100). Рост квантовых точек на вицинальной плоскости GaAs в методе молекулярно-лучевой эпитаксии характеризуется важной особенностью: кластеры InAs оказываются гораздо более однородными по диаметру, чем в случае плоскости (100). Непосредственное наблюдение с помощью атомно-силового микроскопа показывает, что в случае плоскости (100) происходит агломерация кластеров, подобно тому, как сливаются друг с другом капельки жидкости из-за влияния поверхностного натяжения. Ничего подобного не происходит на вицинальной плоскости: по-видимому, этот факт связан с тем обстоятельством, что вицинальная плоскость вовсе не есть атомно-гладкая поверхность. В реальности она является ступенчатой поверхностью; ступеньки, идущие по плоскостям (100), ориентированы под малым углом к мысленной



**Рис. 1.** Атомно-силовое изображение массива квантовых точек, выращенных на поверхности GaAs(100) (*a*) и на вицинальной поверхности GaAs, разориентированной к (100) на угол  $6^\circ$  (*b*).

плоскости поверхности. Видимо, движение адсорбированных атомов In по вицинальной поверхности в процессе эпитаксии оказывается гораздо более затрудненным, чем по плоскости (100), вследствие чего и не происходит агломерации кластеров.

**1. Атомно-силовое изображение.** На рис. 1, *a* дано изображение участка вицинальной поверхности с квантовыми точками, полученное с помощью атомно-силового микроскопа. На рис. 1, *b* для сравнения представлена картина для плоскости (100), на которой хорошо видны агломераты. В настоящей работе показано, что визуальное исследование изображения позволяет определить многие важные параметры массива квантовых точек, а именно следующие: поверхностная плотность квантовых точек  $N$ ; средняя площадь поверхности, приходящаяся на один кластер,  $S$ ; средний диаметр кластера  $D = 2R$ ; средняя толщина квантовой точки  $b$ . Для нахождения последней величины требуется знать число монослоев  $n_M$ , которое пошло на выращивание массива кластеров. Оно задается временем эпитаксии, которое обычно бывает известно. Однако при этом определяется не  $n_M$ , а несколько большая

величина  $n_M^{tot}$ :

$$n_M^{tot} = n_M + n_W, \quad (1)$$

в нашем случае  $n_M^{tot} = 2.9 \text{ ML}$ . Величина  $n_W$  — это число монослоев, которое пошло на образование смачивающего слоя. Согласно [3], мы примем, что  $n_W = (1.7 \pm 0.2) \text{ ML}$ . Таким образом, получим, что  $n_M = (1.2 \pm 0.2) \text{ ML}$ .

**2. Параметры массива квантовых точек.** Рассмотрим конкретно, какие значения принимают упомянутые выше параметры в случае изображения, представленного на рис. 1, а.

А. Поверхностная плотность квантовых точек. Для ее определения достаточно подсчитать число точек на изображенном участке (180 штук) и измерить площадь участка ( $17 \cdot 10^4 \text{ nm}^2$ ). Это дает  $N = 1.06 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Относительная погрешность этой величины составит  $1/\sqrt{180} = 0.08$ , т.е.  $N = (1.06 \pm 0.08) \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ .

Б. Средняя площадь поверхности, приходящаяся на один кластер,  $S$ . Эта величина определяется следующим соотношением:

$$S = 1/N, \quad S = 0.95 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^{-2}. \quad (2)$$

В. Средний диаметр квантовой точки. Непосредственное измерение дает  $D = (20 \pm 4) \text{ nm}$ ,  $R = 10 \text{ nm}$ .

Г. Средняя толщина кластера. Она определяется числом монослоев  $n_M$ , которое пошло на образование массива кластеров на поверхности, и толщиной одного монослоя  $h_M$ . Их произведение дает толщину слоя. Если же все вещество, выпавшее на площадь  $S$ , переместится на меньшую площадь  $\pi R^2$ , то средняя толщина кластера станет больше на величину множителя  $S/\pi R^2 = 3.03 \approx 3$ . Тогда средняя толщина кластера  $b$  будет определяться формулой

$$b = n_M h_M S / \pi R^2, \quad (3)$$

согласно (1) имеем  $n_M = 1.2 \text{ ML}$ . Известно, что  $h_M = 0.3 \text{ nm}$ , отсюда  $b = 1.08 \text{ nm}$ .

**3. Параметры формы кластера — квантовой точки.** Аппроксимируем форму кластера сферическим сегментом, который изображен на рис. 2. Этот сегмент характеризуется двумя параметрами: радиусом кривизны  $R_S$  и высотой  $a$  либо радиусом основания  $R$  и той же высотой  $a$ . Между величинами  $R_S$  и  $R$  имеется связь:

$$2aR_S = R^2 + a^2. \quad (4)$$

Несложный расчет приводит к следующему выражению для средней высоты:

$$b = \frac{a}{2} \left( 1 + \frac{a^2}{3R^2} \right); \quad a \approx 2b \left( 1 - \frac{4b^2}{3R^2} \right). \quad (5)$$

Используя эту формулу и ранее полученные числа, получаем высоту сферического сегмента  $a = 2.1$  nm. Для расчета энергетических уровней в кластере заменим сферический сегмент на подложке в виде пластины (смачивающий слой) сферой, вписанной в это образование [4,5]. Очевидно, что диаметр вписанной сферы  $d$  будет равен сумме толщины сегмента и толщины смачивающего слоя:

$$d = a + h_{MnW}. \quad (6)$$

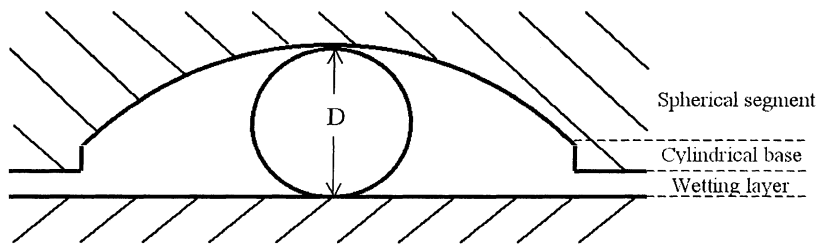
Используя полученные ранее значения, найдем, что  $d = 2.6$  nm. Эта величина оказалась несколько больше, чем использованное нами ранее значение  $d = 2.2$  nm [6]. Попытаемся приблизиться к этому значению за счет учета подкладки в один монослой под сферическим сегментом, как это показано на рис. 3. При этом среднюю толщину  $b$  следует заменить на величину  $b_C = b - 0.3$ . Очевидно, что  $b_C = 0.78$  nm. Согласно формуле (5), это приводит к значению толщины сегмента  $a = 1.56$  nm, что дает  $d = 2.4$  nm. Такое значение диаметра моделирующей сферы мы и будем использовать в дальнейшем.

**4. Энергии носителей в сферической модели кластера.** Положение энергетических уровней электронов и дырок в кластере нетрудно рассчитать, если воспользоваться сферической моделью кластера, как это было сделано в [4,5]. В этой модели использование плавной огибающей справедливо также и в неквадратичном приближении закона дисперсии электронов [4]. Решая волновое уравнение с граничными условиями непрерывности волновой функции и ее производной на поверхности сферы при  $r = d/2$ , нетрудно получить хорошо известное уравнение для дискретного значения волнового вектора  $k$ :

$$-\operatorname{ctg} \left( \frac{kd}{2} \right) = q/k, \quad (7)$$

$$q^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2} (\Delta E - E(k)), \quad (8)$$

где  $q$  — параметр спада волновой функции вне кластера,  $m_2$  — эффективная масса носителя вне кластера,  $\Delta E$  — разрыв края зоны



**Рис. 2.** Модель квантовой точки, содержащая три области из арсенида индия: смачивающий слой (толщина принята равной 1.7 монослоя), цилиндрическое основание (толщина принята равной 1 монослою) и сферический сегмент, радиус кривизны которого определяется по средней толщине квантовой точки. Внутри вписана сфера, энергетический спектр которой моделирует энергетический спектр носителя в квантовой точке.

проводимости или валентной зоны,  $E(k)$  — закон дисперсии носителя внутри ямы; для дырок мы принимаем его изотропным и квадратичным

$$E_v(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}, \quad (9)$$

здесь  $m_v = 0.4m_0$  — стандартная эффективная масса тяжелой дырки в InAs; гофрировкой изоэнергетической поверхности дырки пренебрегается. В нашей работе [4] показано, что для электронов кластера InAs очень важно учитывать неквадратичность закона дисперсии, и для этого закона мы подобрали следующую феноменологическую формулу:

$$E_c(k) = \frac{E_1}{2} \left( \sqrt{1 + \frac{2\hbar^2 k^2}{m_1 E_1}} - 1 \right), \quad (10)$$

здесь  $m_1 = 0.06m_0$  и  $E_1 = 0.4 \text{ eV}$  — подгоночные параметры массы и энергии соответственно. Для решения уравнения (7) нужно знать величины разрывов зон, которые выберем согласно обычному правилу  $\Delta E_c = 0.65\Delta E_g$ ,  $\Delta E_v = 0.35\Delta E_g$ , тогда получаем (с достаточной точностью)  $\Delta E_c = 0.7 \text{ eV}$ ,  $\Delta E_v = 0.4 \text{ eV}$ . При таком подходе мы пренебрегаем увеличением ширины запрещенной зоны в кластере из-

за его возможного сжатия. Возведя в квадрат уравнение (7), придадим ему в случае электронов следующий вид:

$$I_e(x) = \Delta E_c - \frac{E_1}{2} \left( \sqrt{1 + \frac{4E_{d1}x^2}{E_1}} - 1 \right), \quad I_e(x) = E_{d2}x^2 \operatorname{ctg}^2(x), \quad (11)$$

$$x = \frac{kd}{2}, \quad E_{d1} = \frac{2\hbar^2}{m_1d^2}, \quad E_{d2} = \frac{2\hbar^2}{m_2d^2}. \quad (12)$$

Используя вышеуказанные параметры, получим  $E_{d1} = 0.44$  eV,  $E_{d2} = 0.407$  eV. Решая трансцендентное уравнение (11) относительно  $x$ , найдем  $x = 1.84$ , что дает энергию ионизации электрона  $I_e = 0.099$  eV. Аналогично дисперсионное уравнение для дырок будет иметь вид:

$$I_v(x) = \Delta E_v - E_{d1}x^2, \quad I_v(x) = E_{d2}x^2 \operatorname{ctg}^2(x). \quad (13)$$

В этом случае  $m_1 = 0.40m_0$ ,  $m_2 = 0.41m_0$  — массы тяжелой дырки внутри и вне кластера соответственно,  $\Delta E_v = 0.4$  eV — разрыв в валентной зоне на границе кластера. Для энергетических параметров дырок получаем значения  $E_{d1} = 0.0645$  eV,  $E_{d2} = 0.0587$  eV. Таким образом, решение дисперсионного уравнения (13) будет  $x = 2.125$ , при этом энергия ионизации дырки  $I_h = 0.106$  eV, а энергия фотона (без учета электронно-дырочного взаимодействия)

$$\hbar\omega = E_{g\text{GaAs}} - (I_e + I_h) = 1.31 \text{ eV}. \quad (14)$$

Экспериментальные спектры фотолюминесценции массива квантовых точек имеют максимум при энергии фотона  $\hbar\omega_{\max} = 1.33$  eV. Отличие на энергию 0.02 eV оказывается в пределах точности используемых вычислений.

## Список литературы

- [1] Kudryashov I.V., Evtikhiev V.P., Tokranov V.E., Kotelnikov E.Yu., Kryganovskii A.K., Titkov A.N. et al. // J. Cryst. Growth. 1999. V. 201/202. P. 1158–1160.
- [2] Evtikhiev V.P., Tokranov V.E., Kryganovskii A.K., Boiko A.M., Suris R.A., Titkov A.N. // Journal of Crystal Growth. 1999. V. 201/202. P. 1154–1157.

- [3] *Moison J.M., Houzay F., Barthe F., Leprince L., André E., Vatel O.* // Appl. Phys. Lett. 1994. V. 64 (2). P. 196–198.
- [4] *Evtikhiev V.P., Konstantinov O.V., Matveentsev A.V.* // Tech. Phys. Lett. 2001. V. 27. N 3. P. 248–250.
- [5] *Asryan L.V., Suris R.A.* // Semicond. Sci. Technol. 1996. V. 11. P. 554–567.