

01;06;12

Численное моделирование особенностей формирования многослойных структур с квантовыми точками при молекулярно-пучковой эпитаксии

© В.А. Егоров, Г.Э. Цырлин

Институт аналитического приборостроения РАН, С.-Петербург

Поступило в Редакцию 11 октября 1999 г.

На основе теории эластичного взаимодействия численно исследованы некоторые особенности роста наностроек в многослойных гетероэпитаксиальных напряженных системах. Найдены возможные сценарии поведения системы вертикально связанных островков при гетероэпитаксиальном росте многослойных систем и интервалы, разделяющие эти сценарии.

Одним из основных направлений в современной фундаментальной и прикладной физике поверхности является изучение процессов формирования наноструктур при гетероэпитаксиальном росте в рассогласованных по параметру постоянной решетки системах [1,2]. Это связано с тем, что квантовые точки, образующиеся в результате распада напряженного псевдоморфного слоя на границе раздела подобных полупроводников, открывают пути к созданию оптоэлектронных приборов нового поколения [3,4] и позволяют моделировать свойства "искусственных атомов" [5]. Достигнутый прогресс в теории образования наноструктур [6] и обнаружение эффектов упорядоченности квантово-размерных образований на поверхности в системе (InAs, InGaAs)/GaAs непосредственно при молекулярно-пучковой эпитаксии [7,8] позволяют надеяться на получение квантово-размерных структур с заранее заданными геометрическими свойствами. В работе [9] предложена модель процесса самоорганизации квантовых точек, состоящая в создании многослойных структур, и приведены подтверждающие экспериментальные данные по "эффективной" самоорганизации $\text{Si}_{0.25}\text{Ge}_{0.75}$ на поверхности Si. В этой работе, в частности, получено предельное значение устойчивого расстояния между отдельными наностройками — $3.5L$ в слое, начиная

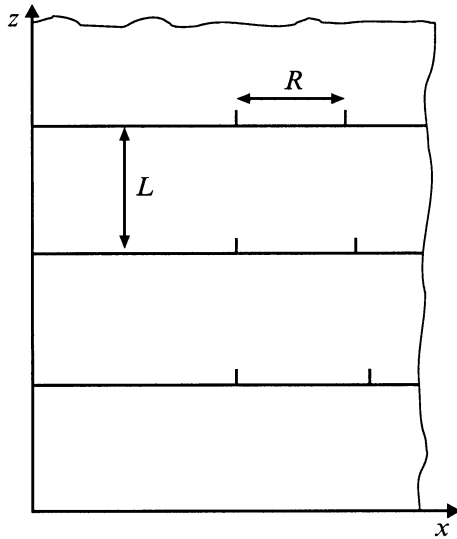


Рис. 1. Схема расположения островков в гетероэпитаксиальной многослойной системе: L — толщина спейсера, R — расстояние между соседними островками в одном слое.

с некоторого, где L — характерное расстояние между слоями системы (толщина спейсера). Однако экспериментальные данные [10,11] в системе InGaAs/GaAs вступают в противоречие с данными [9], поскольку свидетельствуют о наличии по крайней мере интервала устойчивых расстояний. Возможность вертикальной корреляции и антикорреляции вертикально связанной системы плоских наноструктур (высота которых гораздо меньше поперечных размеров) в многослойных гетероэпитаксиальных структурах была рассмотрена в работе [12].

Данная работа посвящена изучению образующихся при гетероэпитаксиальном росте наноструктур, их совместного поведения при выращивании многослойных структур с массивами квантовых точек с помощью численных методов, основанных на теории Марадудина [13], и возможность их применимости к реальным системам.

На рис. 1 представлена геометрия рассматриваемой системы из двух одинаковых по форме и размерам (что приводит к одинаковым по

амплитуде вкладов в упругую энергию поверхности) островков в двух случаях: когда уменьшение расстояния между островками приводит к их слиянию и образованию в последующем слое одного островка — ”слияние и уничтожение” и когда увеличение расстояния между островками приводит к появлению между ними еще одного — ”расхождение и рождение”. При этом осуществляется поиск критических значений расстояний между островками, после прохождения которых в большую или меньшую сторону (в зависимости от ситуации) картина расположения островков в последующем слое претерпевает количественные изменения, т.е. их общее число увеличивается или уменьшается.

Расчет проводится в рамках теории Марадулина: берется один дефект — наноостровок (считается, что островок имеет точечные латеральные размеры, но при этом обладает некоторой высотой — разный объем островков приводит к разным по интенсивности вкладам в упругую энергию) и рассчитывается упругое взаимодействие этого дефекта со всей поверхностью по формуле:

$$U(x) = C(x^2 + L^2)^{-3/2} P_2\left(x^2 / (x^2 - L^2)^{1/2}\right),$$

где C — коэффициент, пропорциональный объему наноостровка, также включает в себя упругие константы материалов, L — толщина спейсера, P_2 — полином Лежандра; затем берется следующий дефект и т.д. Общее изменение упругой энергии поверхности складывается из суммы вкладов всех дефектов. Затем происходит процесс высаживания наноостровков на поверхности в областях с минимумами упругой энергии, заращивание слоя; процесс повторяется до достижения системой устойчивой конфигурации островков. При этом, в рамках рассматриваемой теории основным параметром, воздействующим на положение островков в слое, оказывается толщина спейсера. Моделирование проводится для двумерного случая.

Для численных расчетов используются следующие параметры системы: расстояние между слоями $L = 50 \text{ \AA}$, что является характерным размером, используемым, в частности, в экспериментах [10,11]; поперечный размер системы порядка 1000 \AA , в начальном слое один островок (левый) помещается в фиксированное положение $x_1 = 200$, положение островка справа варьируется, размеры островков выбираются одинаковыми для получения ясной картины поведения системы, взаимодействие с границами образца не учитывается.

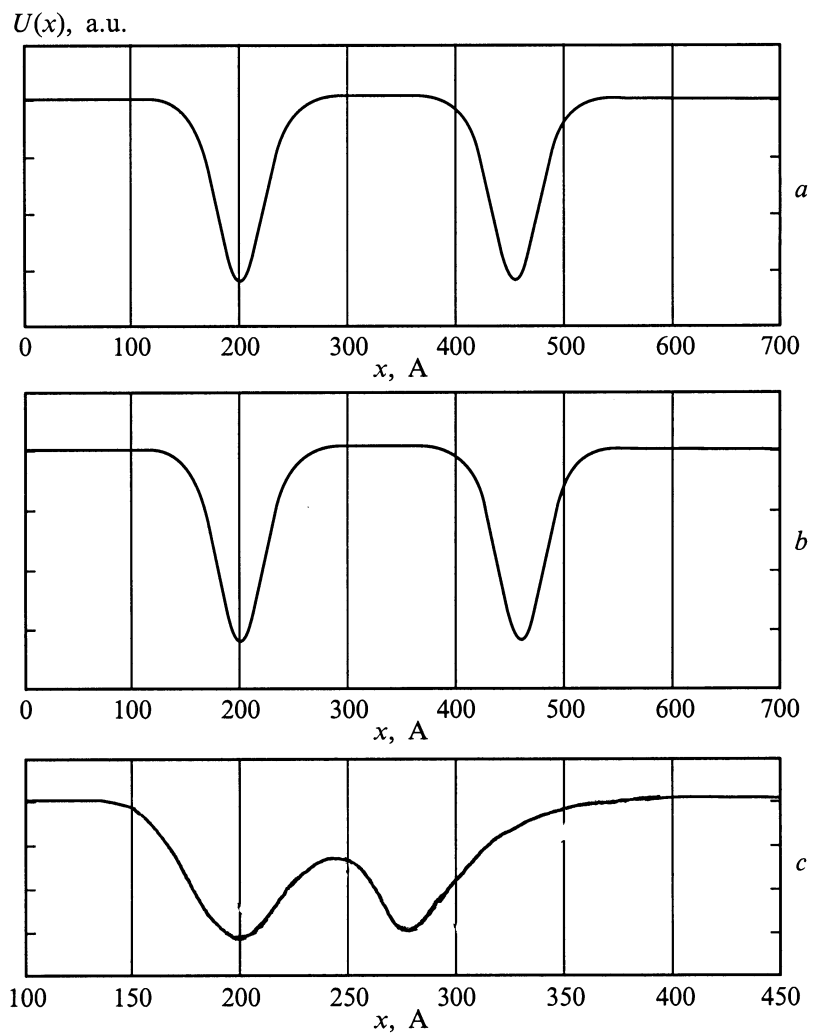


Рис. 2. Профили упругой энергии во втором слое гетероэпитаксиальной многослойной системы двух наноостровков. Положение левого островка $x_1 = 200$ А, положение правого островка: $x_2 = 455$ А (a), 460 А (b), 280 А (c).

На рис. 2, *a* представлена ситуация, когда правый островок помещен в $x_2 = 455$ (расстояние между островками $5.1L$). При этом возникающие во втором слое минимумы упругой энергии оказываются практически (в пределах погрешности счета, составляющей приблизительно $0.05 A$) точно над островками в начальном слое, что приводит к возникновению вертикально коррелированной системы наноструктур, причем очень хорошо коррелированной, — если брать положения островков в каждом слое смещенными в пределах погрешности каждый раз в одну сторону (худший вариант), то за 1000 слоев происходит отклонение на величину 5 \AA , т.е. структура сдвинется на межатомное расстояние (такое количество слоев, очевидно, не представляет реального интереса). Но при смещении вправо второго островка в системе происходит количественное изменение: при расстояниях, начиная с $5.2L$, появляется еще один минимум в упругой энергии поверхности (рис. 2, *b*), что в рамках используемого метода расчета рассматривается как центр нуклеации для последующего слоя, и это приводит к возникновению третьего островка между двумя исходными, что показано на рис. 3. Таким образом, видно, что при расстояниях между островками до $5.1L$ система устойчива в смысле рождения новых центров нуклеации. При увеличении расстояния начиная с примерно $5.2L$ происходит акт рождения нового островка между ними в следующем слое.

Займемся теперь поиском другого критического значения расстояний между островками, меньше которого будут происходить количественные изменения в системе. На рис. 2, *c* положение $x_2 = 280$ ($1.6L$), при этом положение минимумов упругой энергии начинают немного смещаться и становятся $x_1 = 200.8$, и $x_2 = 279.2$ для левого и правого островка соответственно. Нуклеация в этих положениях во втором и последующих слоях приведет к еще большему сближению минимумов. Через некоторое количество слоев система придет к состоянию, изображенному на рис. 4.

Таким образом, возможны несколько сценариев развития системы наноструктур в зависимости от расстояния R между ними:

- 1) при $R \leq 1.6L$ — сближение островков с последующим их слиянием,
- 2) при $R \geq 5.2L$ — образование дополнительного островка,
- 3) в промежуточном интервале — устойчивые состояния без слияния или рождения островков.

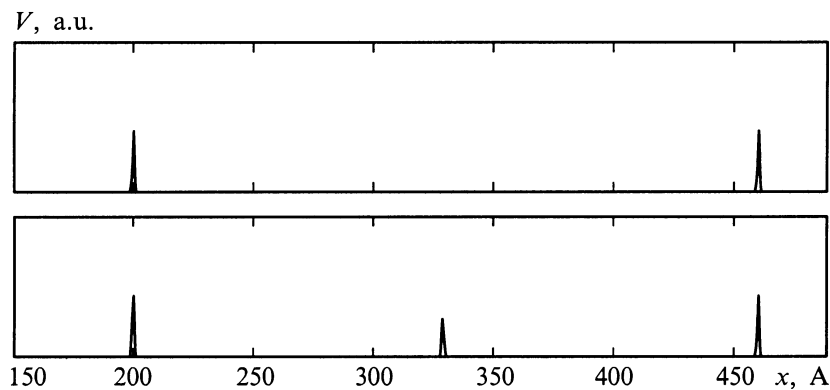


Рис. 3. Сверху: начальное распределение островков в первом слое. Снизу: появление третьего островка во втором слое. Объем островков дан в относительных единицах.

В реальной системе со многими островками возможно комбинированное проявление этих сценариев.

Анализ уравнений, используемых в расчетах, дает более узкий диапазон значений R ($2.8L-4L$), при которых система находится в устойчивом состоянии. Однако на практике для того, чтобы заметить существенный сдвиг островков вследствие экспоненциальной зависимости увеличения скорости сближения островков и мало заметного сдвига (доли ангстрем) в начальные этапы при R , близких к $2.8L$, потребуется неразумно большое для реально существующих на сегодняшний день экспериментов число слоев (> 1000), чтобы они наконец сблизилась и слились.

Из расчетов видно, что значения расстояний, близких к критическим и даже собственно критические (те, которые разделяют эти три случая), оказываются "устойчивыми" в смысле сдвигов положения точек в последующих слоях. Таким образом, положение о существовании некоего определенного расстояния между островками, к которому стремится система при большом числе слоев, а именно $3.5L$, имеет смысл подвергнуть сомнению.

Таким образом, нами были численно исследованы некоторые особенности роста наноструктур в многослойных гетероэпитаксиальных

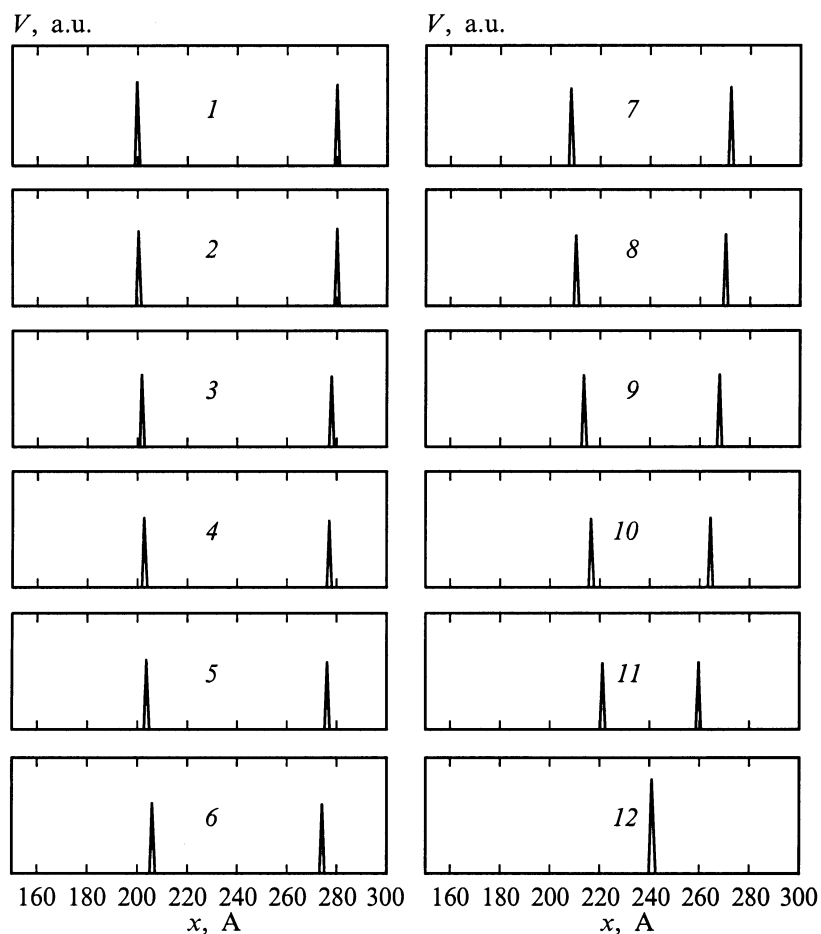


Рис. 4. Эволюция системы двух наностроек. Числами пронумерованы слои структуры. Объем островков дан в относительных единицах.

системах. Найдены возможные сценарии развития системы вертикально связанных островков при гетероэпитаксиальном росте многослойных систем, а также интервалы, разделяющие эти сценарии. Данные результаты качественно согласуются с экспериментами [10,11], в которых к

5–10 слою образуется упорядоченная система наностроек, отстоящих друг от друга на расстояния от $3L$ до $5L$. В дальнейших работах на эту тему предполагается исследовать влияние формы наностроек на их относительное расположение в соседних слоях гетероэпитаксиальной структуры.

В заключение авторы выражают благодарность РФФИ (грант № 98–18317) и Программе "Физика твердотельных структур" (грант № 98–2029) за частичную финансовую поддержку данной работы. Г.Э. Цырлин благодарен за финансовую поддержку ИНТАС (грант № YS 54).

Список литературы

- [1] Goldstein L., Flas F., Marzin J.Y., Charasse M.N., Le Roux G. // Appl. Phys. Lett. 1985. V. 47. P. 1099.
- [2] Mo Y-W., Swartzentruber B.S., Kariotis R., Webb M.B., Lagally M.G. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. P. 2393.
- [3] Kirstaedter N., Ledentsov N.N., Grundmann M., Bimberg D., Ustinov V.M., Ruvimov S.S., Maximov M.V., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I., Richter U., Werner P., Gösele U., Heydenreich J. // Electron. Lett. 1994. V. 30. P. 1416.
- [4] Ledentsov N.N., Grundmann M., Kirstaedter N., Schmidt O., Heitz R., Böhrer J., Bimberg D., Ustinov V.M., Shchukin V.A., Egorov A.Ya., Zhukov A.E., Zaitsev S., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I., Ruvimov S.S., Kosogov A.O., Werner P., Gössele U., Heydenreich J. // Solid State Electronics. 1996. V. 40. P. 785.
- [5] Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Шукин В.А., Копьев П.С., Алферов Ж.И., Бимберг Д. // ФТП. 1998. Т. 32. С. 358.
- [6] Shchukin V.A., Ledentsov N.N., Kop'ev P.S., Bimberg D. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 75. P. 2968.
- [7] Cirilin G.E., Guryanov G.M., Golubok A.O., Tpishev S.Ya., Ledentsov N.N., Kop'ev P.S., Grundmann M., Bimberg D. // Appl. Phys. Lett. 1995. V. 67. P. 97.
- [8] Grundmann M., Christen J., Ledentsov N.N., Böhrer J., Bimberg D., Ruvimov S.S., Werner P., Richter U., Gössele U., Heydenreich J., Ustinov V.M., Egorov A.Ya., Zhukov A.E., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. P. 4043.
- [9] Tersoff J., Teichert C., Lagally M.G. // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 76. P. 1675.
- [10] Цырлин Г.Э., Петров В.Н., Масалов С.А., Голубок А.О. // ФТП. 1999. Т. 33. Вып. 6. С. 733.

- [11] Цырлин Г.Э., Петров В.Н., Масалов С.А., Голубок А.О., Леденцов Н.Н. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 22. С. 80.
- [12] Schukin A.A., Bimberg D., Malyshkin V.G., Ledentsov N.N. // Phys. Rev. B 1998. V. 57. P. 12262.
- [13] Maradudin A.A., Wallis R.F. // Surf. Sci. 1980. V. 91. P. 423.