

07.03.12

Упругие поля и физические свойства поверхностных квантовых точек

© Н.А. Берт¹, А.Л. Колесникова², И.К. Королев², А.Е. Романов^{1,3},
А.Б. Фрейдин², В.В. Чалдышев¹, Е.С. Aifantis³

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

² Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

³ Aristotle University of Thessaloniki,
Thessaloniki, Greece

E-mail: aer@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 10 марта 2011 г.

В окончательной редакции 17 марта 2011 г.)

Представлены упругие поля в системе, состоящей из поверхностной осесимметричной когерентной квантовой точки-островка (КТ), и массивной подложки. Упругие поля получены методом конечных элементов. Проанализировано влияние формы и относительных размеров δ КТ на сопутствующие ей поля. Выявлены два критических относительных размера δ_{c1} и δ_{c2} . Найдено, что поля не зависят от формы и относительных размеров КТ при $\delta > \delta_{c1}$ и верхушка КТ остается практически неискаженной при $\delta \geq \delta_{c2}$. Показано, что компонента напряжений σ_{zz} , где z — ось симметрии КТ, демонстрирует область растяжения, локализованную под КТ в подложке на некотором расстоянии от интерфейса. На основании приближенной аналитической формулы для радиальной компоненты смещений рассчитаны электронно-микроскопические изображения системы InSb/InAs для островков с $\delta > \delta_{c1}$. Рассмотрена возможность релаксации напряжений в системе, заключающаяся в образовании дислокационной призматической петли внедрения вблизи КТ.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 10-02-91057-NCNI_a) и Европейского сообщества (Мари Кюри проект).

1. Введение

Известно, что упругие поля, вызываемые когерентными островками или, другими словами, поверхностными квантовыми точками (КТ), сильно влияют на электронные свойства самих островков и их окрестности (см., например, [1–6]). Теоретическое исследование упруго-пластического поведения поверхностных когерентных КТ проводится начиная с 1995 г. [1]. При этом используются три основных подхода к нахождению упругих полей КТ. Это аналитическое или численное решение уравнений теории упругости в рамках представления КТ как когерентного включения, метод конечных элементов (МКЭ) и метод молекулярной динамики. Каждая публикация, касающаяся этой проблемы, преследует определенную практическую цель. В работах [7–15] поля смещений и деформаций строились с целью рассчитать электронно-микроскопические (ЭМ) изображения КТ. В работе [16] были найдены поля и энергии КТ для того, чтобы оценить эффект взаимодействия КТ через подложку. В этих работах для нахождения полей использовался в основном МКЭ. Помимо этого в [16] приведено сравнение численных результатов на базе МКЭ и модельных расчетов, допускающих запись полей от КТ в подложке через элементарные функции. Что касается применения к поверхностным КТ аналитических методов теории упругости, отметим как последнее достижение работу [17], в которой поля

поверхностной КТ представлены в приближенном аналитическом виде.

Цель настоящей работы состоит в построении упругих полей когерентной КТ на подложке методом конечных элементов, анализе влияния формы и характеристического отношения на упругие поля системы и применении полученных результатов для расчета ЭМ-изображений КТ и моделирования релаксации механических напряжений КТ за счет образования призматической дислокационной петли вблизи КТ.

2. Упругая модель и упругие поля когерентной квантовой точки

2.1. Геометрия и параметры задачи. Квантовая точка моделируется островком осесимметричной формы, помещенным на подложку, размеры которой много больше высоты островка h и его максимального латерального диаметра $2d$ (рис. 1, a, b). Характеристическое отношение геометрических размеров (aspect ratio) островка определяется выражением $\delta = h/(2d)$. Кристаллическая решетка островка когерентна кристаллической решетке подложки в области их соприкосновения. Упругие поля являются следствием условия когерентности. При этом полные смещения в системе определяются относительно состояния недеформированной подложки. Компоненты собственной деформации островка в де-

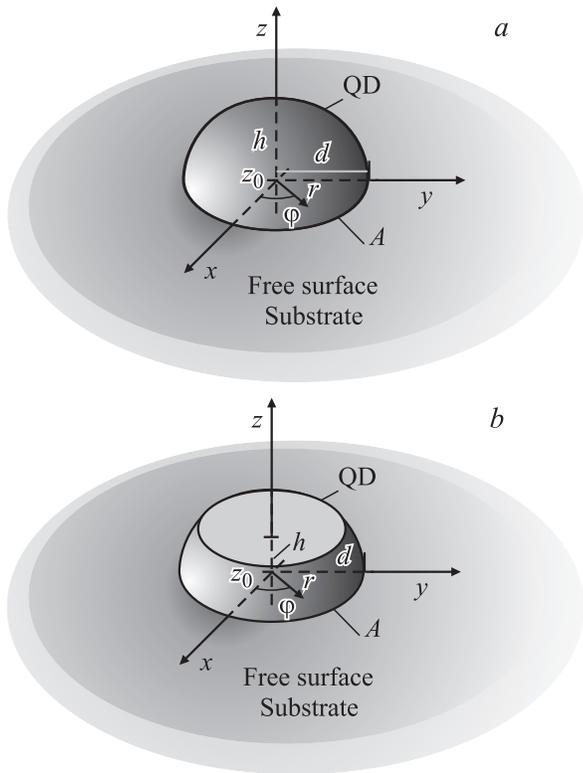


Рис. 1. Квантовая точка — островок (QD) в форме сферического сегмента (a) и усеченного сферического сегмента (b) на поверхности подложки (substrate). Показаны декартова (x, y, z) и цилиндрическая (r, φ, z) системы координат. Положение поверхности подложки, включающей в себя плоскую часть свободной поверхности системы и поверхность прилегания квантовой точки к подложке, имеет координату z_0 . A — граница линия между свободной поверхностью островка и свободной поверхностью подложки, h — высота квантовой точки, $2d$ — максимальный латеральный размер.

картовой (x, y, z) и цилиндрической (r, φ, z) системах координат (рис. 1) заданы соотношением

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx}^* &= \varepsilon_{yy}^* = \varepsilon_{rr}^* = \varepsilon_{\varphi\varphi}^* = \varepsilon^* = \frac{a_{\text{QD}} - a_{\text{Sub}}}{a_{\text{Sub}}}, \\ \varepsilon_{zz}^* &= \varepsilon^* = \frac{a_{\text{QD}} - a_{\text{Sub}}}{a_{\text{Sub}}}, \\ \varepsilon_{r\varphi}^* &= \varepsilon_{rz}^* = \varepsilon_{\varphi z}^* = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где a_{QD} и a_{Sub} — параметры кристаллических решеток КТ и подложки соответственно. Отметим, что параметр несоответствия, определяемый для пленки на подложке, $f = \frac{a_{\text{Sub}} - a_{\text{film}}}{a_{\text{film}}}$ [18] имеет обратный знак.

Исследования влияния формы и характеристических размеров островка на упругие поля проводились для системы InSb-островок/InAs-подложка. В этой системе параметры кристаллических решеток и собственные деформации островка составляют $a_{\text{InSb}} = 0.6479 \text{ nm}$, $a_{\text{InAs}} = 0.60583 \text{ nm}$ [19] и $\varepsilon_{xx}^* = \varepsilon_{yy}^* = \varepsilon_{zz}^* = \varepsilon^* = \frac{a_{\text{InSb}} - a_{\text{InAs}}}{a_{\text{InAs}}} \approx 0.069$ соответственно.

Поля смещений, деформаций и напряжений в рассматриваемых системах определялись методом конечных элементов с помощью программы ANSYS. В расчетах были использованы следующие параметры материалов: модули сдвига $G_{\text{InSb}} = 1.51 \cdot 10^{10} \text{ N/m}^2$, $G_{\text{InAs}} = 1.90 \cdot 10^{10} \text{ N/m}^2$ и коэффициенты Пуассона $\nu_{\text{InSb}} = \nu_{\text{InAs}} = 0.35$ [19].

Корректность полученных с помощью МКЭ полей подтверждалась выполнением граничных условий на свободной поверхности и интерфейсе

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}|_{\text{free surface}} = 0, \quad (2a)$$

$$\mathbf{u}^{\text{QD}}|_{\text{interface}} = \mathbf{u}^{\text{Sub}}|_{\text{interface}}, \quad (2b)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{QD}} \cdot \mathbf{u}|_{\text{interface}} = \boldsymbol{\sigma}^{\text{Sub}} \cdot \mathbf{n}|_{\text{interface}}, \quad (2c)$$

где $\boldsymbol{\sigma}^{\text{QD}}$ и $\boldsymbol{\sigma}^{\text{Sub}}$ — напряжения в КТ и подложке соответственно, $\boldsymbol{\sigma}$ — напряжения в КТ и подложке, зависящие от того, где находится свободная поверхность, \mathbf{u}^{QD} и \mathbf{u}^{Sub} — смещения в КТ и подложке, \mathbf{n} — нормаль к свободной поверхности или интерфейсу.

2.2. Поле смещений в КТ и подложке. Влияние формы и характеристического отношения δ на поле смещений КТ. В силу осевой симметрии островка поле смещений обладает двумя ненулевыми компонентами $u_r(r, z)$ и $u_z(r, z)$ в выбранной цилиндрической системе координат (r, φ, z) (рис. 1). На рис. 2 и 3 представлены распределения компонент поля полных смещений \mathbf{u} в системе InSb/InAs с островком в форме сегмента сфероида с радиусом, равным 21 (все линейные величины в расчетах выражены в произвольных единицах). Размеры островка составляют $h = 7$, $2d = 31.3$, $\delta = 0.22$. Найденные смещения удовлетворяют условию непрерывности (2b) на границе между островком и подложкой (рис. 2, a, 3, a).

На основании приведенных распределений можно заметить, что внутри КТ радиальная компонента смещений $u_r(r, z)$ квазилинейна вдоль координаты r (рис. 2, b). Поэтому возможно следующее представление радиальных смещений внутри КТ: $u_r(r, z) \approx \varepsilon^* \alpha(C, r)r$, где параметр C зависит от упругих модулей КТ и подложки. Стремление получить простую аналитическую формулу для радиальных смещений вызвано тем, что они ответственны за формирование ЭМ-изображения, если волновой вектор электронной волны параллелен оси z (рис. 1) [15]. Эта компонента важна в дальнейшем для расчетов ЭМ-изображений КТ.

Поле смещений было рассчитано для островков трех форм: сферического сегмента, полуэллипсоида и усеченного сферического сегмента при одинаковых характеристических отношениях $\delta = 0.22$. Сравнительные зависимости радиальной компоненты смещений в островках различной формы показаны на рис. 4. Видно, что зависимости $u_r(r)|_{z=\text{const}}$ линейны на значительных участках внутри островка и одинаковы для всех рассматриваемых форм островков. Отличием является протяженность зависимостей $u_r(r)|_{z=\text{const}}$ из-за отличия текущего поперечного размера островков. Таким образом, расчеты

показывают, что изменение формы островка не влияет на смещения в подложке для $\delta = 0.22$. Подчеркнем, что высота h , максимальный латеральный размер $2d$ и параметр δ были одинаковы для всех островков.

При наличии ненулевых компонент смещений $u_r(r, z)$ и $u_z(r, z)$, а также при условии независимости смещений от угловой координаты φ , что характерно для

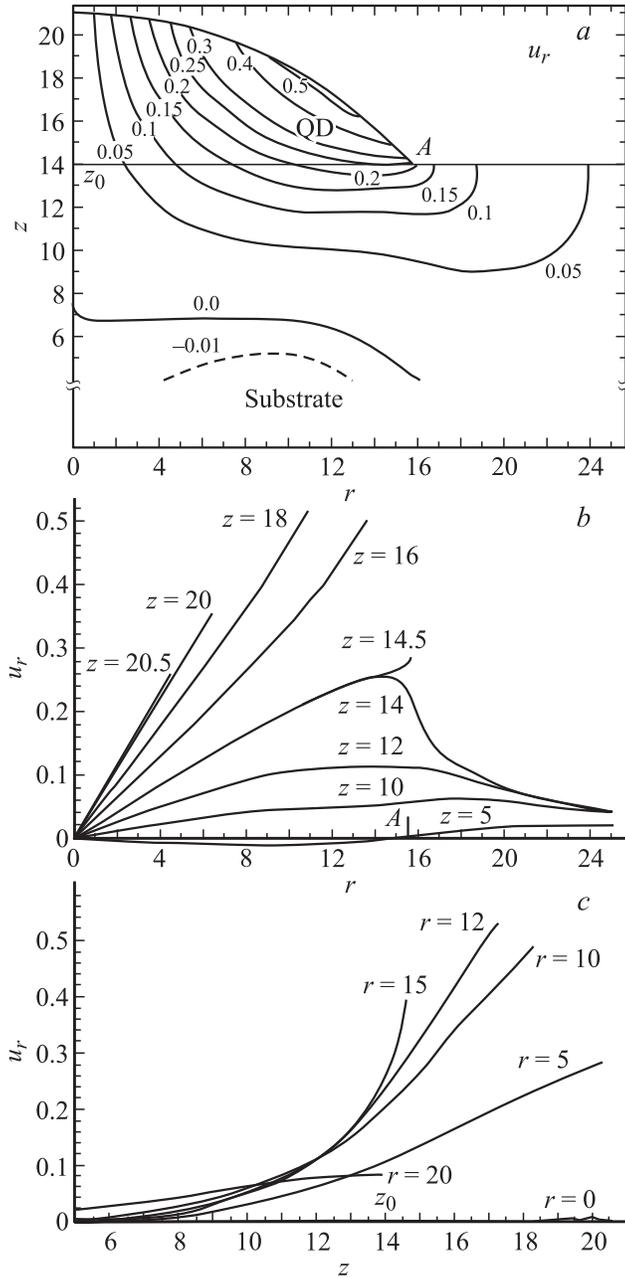


Рис. 2. Радиальная компонента смещений u_r в InSb-островке (QD) и InAs-подложке. *a* — карта изолиний радиальных смещений; *b* — зависимость радиальных смещений от радиальной координаты r ; *c* — зависимость радиальных смещений от координаты z . Все линейные величины выражены в произвольных единицах. Форма островка — сегмент сфероида. Соотношение геометрических размеров островка $\delta = 0.22$. Остальные обозначения те же, что на рис. 1.

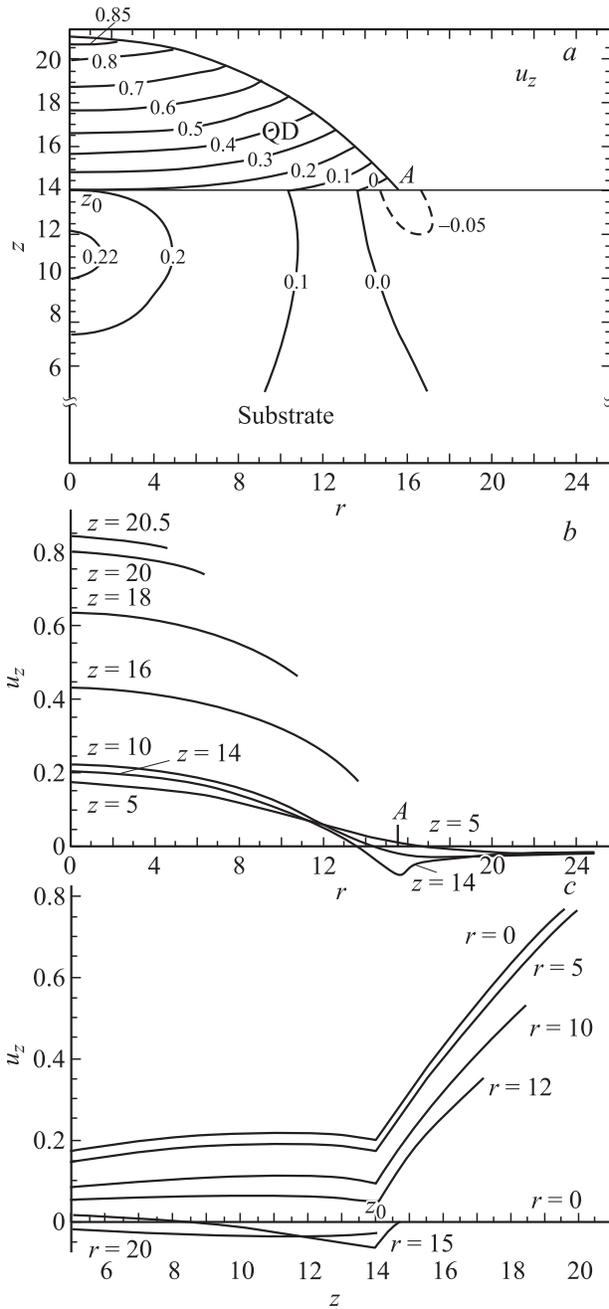


Рис. 3. Компонента смещений вдоль оси z (u_z) в InSb-островке (QD) и InAs-подложке. *a* — карта изолиний смещений u_z ; *b* — зависимость смещений u_z от радиальной координаты r ; *c* — зависимость смещений u_z от координаты z . Все линейные величины выражены в произвольных единицах. Форма островка — сегмент сфероида. Соотношение геометрических размеров островка $\delta = 0.22$. Остальные обозначения — те же, что на рис. 1.

осесимметричной задачи, поле полных деформаций ϵ^t имеет вид

$$\epsilon_{rr}^t = \frac{\partial u_r}{\partial r}, \quad (3a)$$

$$\epsilon_{\varphi\varphi}^t = \frac{u_r}{r}, \quad (3b)$$

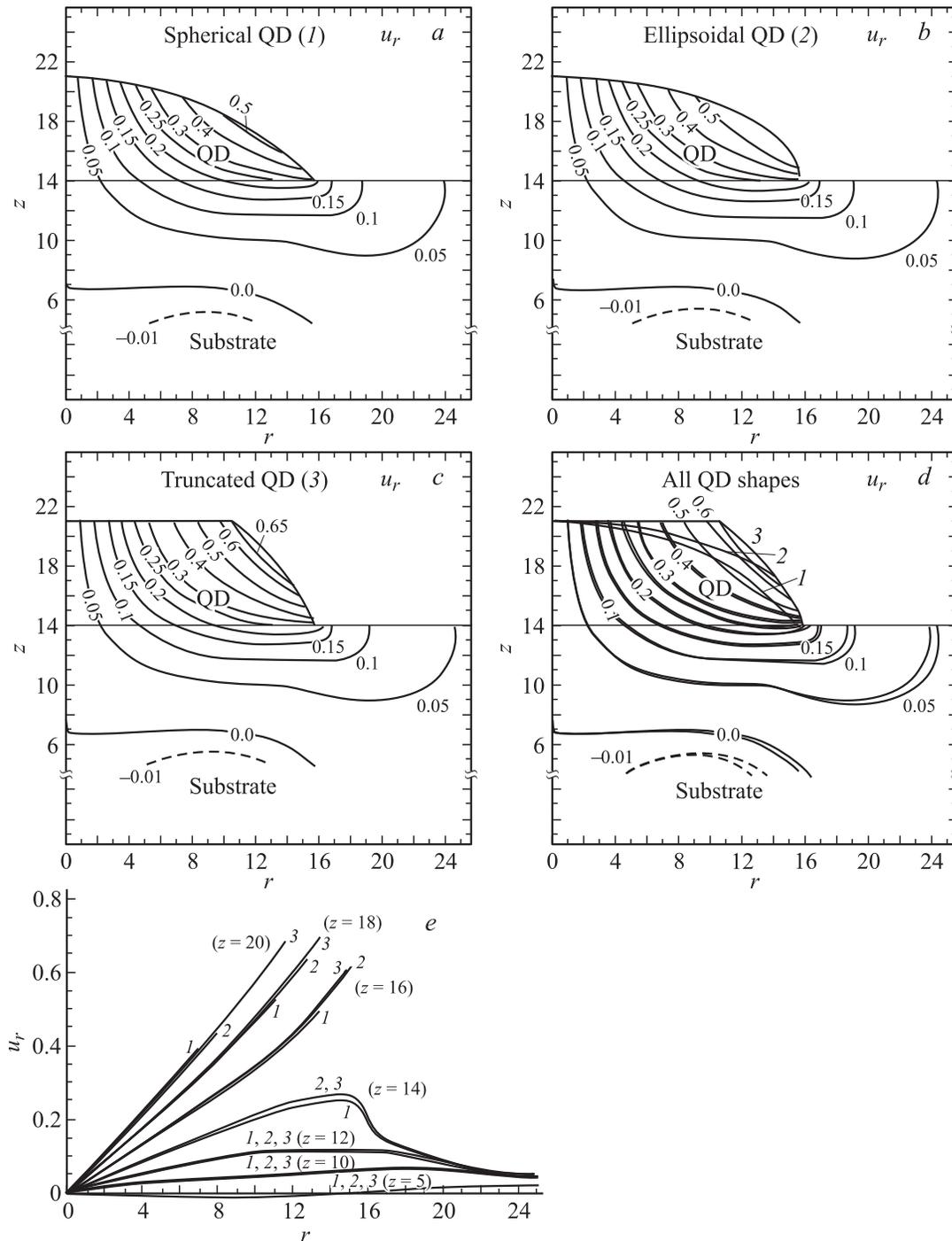


Рис. 4. Радиальные смещения u_r в системе InSb/InAs с островками QD различной формы. Карты изолиний: a — для сферического сегмента, b — для полуэллипсоида, c — для усеченного сферического сегмента, d — для трех форм островков, e — зависимости $u_r(r)|_{z=\text{const}}$: для сферического сегмента (1), для полуэллипсоида (2), для усеченного сферического сегмента (3). Все линейные величины выражены в произвольных единицах. Соотношение геометрических размеров всех форм $\delta = 0.22$.

$$\varepsilon_{zz}^t = \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad (3c)$$

$$\varepsilon_{\varphi z}^t = 0. \quad (3f)$$

$$\varepsilon_{rz}^t = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right), \quad (3d)$$

Упругие деформации ε определяются по формулам

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^t - \varepsilon_{ij}^*, \quad i, j = r, \varphi, z, \quad (4)$$

$$\varepsilon_{r\varphi}^t = 0, \quad (3e)$$

где собственные деформации ε^* имеют три ненулевые компоненты ε_{rr}^* , $\varepsilon_{\varphi\varphi}^*$ и ε_{zz}^* (1).

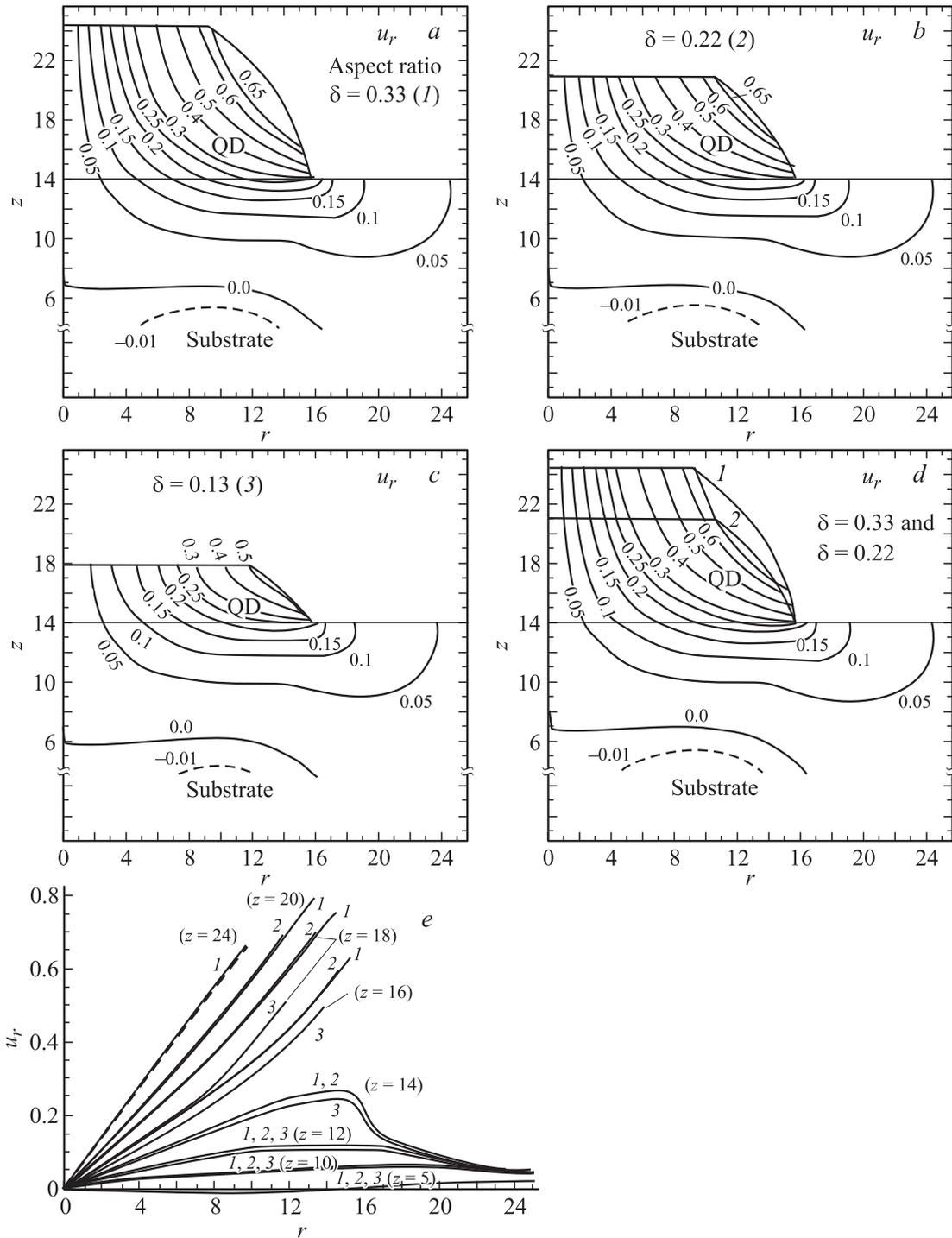


Рис. 5. Радиальные смещения u_r в усеченных квантовых точках с различным характеристическим отношением δ . Карты изолиний для $\delta = 0.33$ (a), 0.22 (b), 0.13 (c). d — сопоставление карт изолиний для $\delta = 0.33$ (1) и 0.22 (2). e — зависимости $u_r(r)|_{z=\text{const}}$ для $\delta = 0.33$ (1), 0.22 (2) и 0.13 (3). Штриховой линией обозначена зависимость $u_r(r)|_{z=\text{const}}$ для некогерентного недеформированного островка. Все линейные величины выражены в произвольных единицах.

Закон Гука позволяет рассчитать напряжения σ с помощью упругих деформаций (4) в КТ и подложке

$$\sigma_{ij} = 2G \left(\varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu} \varepsilon \delta_{ij} \right), \quad i, j = r, \varphi, z, \quad (5)$$

где ε — след тензора упругих деформаций ε_{ij} , $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$, $i, j = r, \varphi, z$, G и ν — модуль сдвига и коэффициент Пуассона области КТ или подложки, зависящие от того, где рассчитываются напряжения.

Для КТ в виде усеченного сферического сегмента с характеристическими отношениями $\delta = 0.13, 0.22$ и 0.33 были вычислены компоненты смещений $u_r(r, z)$, и в дальнейшем на их основе были построены ЭМ-изображения. На рис. 5 представлены распределения изолиний смещений $u_r(r, z)$ и зависимости $u_r(r)|_{z=\text{const}}$, $u_r(z)|_{r=\text{const}}$ для усеченных КТ с различным характеристическим отношением δ . Показательно, что общий вид распределения линий $u_r(r, z) = \text{const}$ в подложке и КТ не зависит от δ . Смещения в подложке практически не зависят от параметра δ , по крайней мере в диапазоне изученных δ . Смещения в КТ увеличиваются с ростом δ , причем для точек с $\delta = 0.22$ и 0.33 распределение смещений по высоте не меняется. Это можно продемонстрировать прямым наложением распределений, показанных на рис. 5, *a* и *b*. Из рис. 5, *d* видно, что карта изолиний рис. 5, *b* в области своего существования полностью совмещается с картой изолиний рис. 5, *a*. Для более низкой КТ с $\delta = 0.13$ есть отличия в распределении смещений (ср., например, рис 5, *c* с рис. 5, *a, b*). На рис. 5, *e* показаны зависимости $u_r(r)|_{z=\text{const}}$ для усеченных островков различной высоты.

Из этих зависимостей видно, что в высоких слоях островка с $\delta = 0.33$ смещения не испытывают влияния интерфейса, т. е. $u_r(r)|_{z=24} = \left(\frac{a_{\text{InSb}} - a_{\text{InAs}}}{a_{\text{InAs}}}\right)r \approx 0.07r$. Можно сделать вывод, что начиная с характеристических отношений $\delta \approx 0.33$ верхние слои островка становятся недеформированными. Исходя из этого можно достраивать радиальные смещения верхних слоев для островков с характеристическим отношением $\delta \geq 0.33$ функцией $u_r(r)|_{z \geq 24} = \left(\frac{a_{\text{InSb}} - a_{\text{InAs}}}{a_{\text{InAs}}}\right)r \approx 0.07r$.

Подытожим исследования влияния формы и характеристического отношения на поля смещений.

1) Существует нижнее критическое значение характеристического отношения δ_{c1} . Квантовые точки, для которых $\delta > \delta_{c1}$, имеют одинаковые распределения упругих полей независимо от формы и величины δ .

2) Существует верхнее критическое значение характеристического отношения δ_{c2} . Верхние слои КТ, у которых $\delta > \delta_{c2}$, остаются практически неискаженными.

Таким образом, рассчитав распределение полей смещений для КТ цилиндрической формы с характеристическим отношением $\delta > \delta_{c2}$ для конкретных материалов, можно построить распределения полей для КТ практически произвольной высоты и формы: сферической, эллиптической, конусной, усеченных фигур и т.д. Это распределение полей смещений для данных материалов можно считать эталонным.

Необходимым условием получения одинаковых распределений для КТ разных геометрических форм является превышение характеристического отношения КТ нижнего критического значения δ_{c1} . Кроме того, форма КТ не должна быть достаточно экзотической, например содержать поверхности отрицательной кривизны, приближая таким образом свободную поверхность КТ к интерфейсу.

Очевидно, что значения δ_{c1} и δ_{c2} зависят от параметра несоответствия или собственной деформации КТ и соотношения упругих модулей КТ и подложки. Выбор значений δ_{c1} и δ_{c2} зависит от того, какая степень расхождения с эталонным распределением смещений допустима.

На практике мы имеем дело с островками, имеющими достаточно высокие значения δ . С помощью рассчитанного ранее распределения смещений для КТ в виде усеченного сферического сегмента (почти цилиндра) (рис. 5, *a*) можно определить смещения в КТ, имеющей любую форму, укладываемуюся в рассчитанную область, при соблюдении условия $\delta > \delta_{c1}$. Небольшие расхождения следует ожидать в области граничной линии *A* (рис. 1) для островков, имеющих сильный наклон к интерфейсу. Расхождения будут и в КТ, и в подложке (рис. 4, *e*). Это результат приближения свободной поверхности КТ к интерфейсу.

Итак, наши расчеты показывают, что в системе InSb/InAs справедливо следующее приближенное выражение для радиальных смещений внутри КТ, обладающей формой, укладываемой в области усеченного сферического сегмента с $\delta \approx 0.33$ (рис. 5, *a*). Эта КТ должна иметь основание, равное основанию рассчитанной усеченной КТ, и характеристическое отношение $\delta > \delta_{c1}$:

$$u_r(r, z) \approx \varepsilon^* \alpha(C, z)r, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha(C, z) = & -20026.969223467313 + 10749.03426298273z \\ & - 2586.307326207409z^2 + 367.3700555027091z^3 \\ & - 34.11696157418375z^4 + 2.164587050193627z^5 \\ & - 0.09502486762201391z^6 + 0.0028503424511646504z^7 \\ & - 0.000055916260743314375z^8 \\ & + 6.480096383902395 \cdot 10^{-7}z^9 \\ & - 3.373361773677481 \cdot 10^{-9}z^{10} \\ & + 8.1051600449704 \cdot 10^{-14}z^{11}, \\ & 14 \leq z \leq 24. \end{aligned}$$

Знакопеременный полином $\alpha(C, z)$ очень чувствителен к округлению числовых коэффициентов. Упрощение $\alpha(C, z)$ требует дополнительного анализа, который нами не проводился. Подчеркнем, что в выбранной геометрии внутри КТ координата z принимает значения от $z_0 = 14$ и выше (рис. 1).

На рис. 6 показано распределение радиальных смещений, рассчитанное методом конечных элементов и по формуле (6). Видно хорошее совпадение распределений, особенно в области оси симметрии КТ.

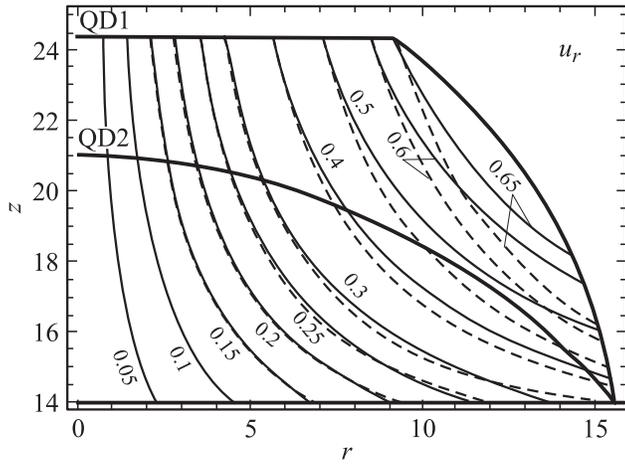


Рис. 6. Радиальные смещения u_r в квантовых точках QD1 и QD2. Сплошной линией обозначены смещения, полученные с помощью приближенной формулы, штриховой — смещения, полученные методом конечных элементов. Все линейные величины выражены в произвольных единицах.

Распространяя наши выводы на системы КТ/подложка с другими параметрами несоответствия кристаллических решеток, можно предположить, что критические характеристические величины для этих систем можно оценивать как

$$\delta_{c1} \approx 2\varepsilon^*, \quad \delta_{c2} \approx 5\varepsilon^*.$$

Для определения приближенных аналитических формул для смещений $u_z(r, z)$ в КТ и поля смещений $u_i(r, z)$ ($i = r, z$) в подложке лучше всего пользоваться интерполяционными формулами для двумерного массива, которые дают стандартные программы интерполяции (см., например, пакет программ „Wolfram Mathematica“).

Метод конечных элементов позволяет без труда построить все необходимые для исследований упругие поля конкретной выбранной системы КТ/подложка. Рекомендуем построить поля смещений (две компоненты) и напряжений (четыре компоненты) одного цилиндрического островка с $\delta > \delta_{c2}$. Это позволит строить ЭМ-изображения КТ, рассчитывать энергии и моделировать релаксационные процессы для островков с $\delta > \delta_{c1}$ практически произвольных форм.

2.3. Поле напряжений в квантовой точке и подложке. На рис. 7–9 приведены результаты вычисления поля напряжений, возникающего в системе для КТ в форме сферического сегмента (рис. 1, a). Представлены нормальные компоненты напряжений.

Предварительный анализ характера напряжений позволяет сделать следующее предположение о пути их релаксации: в области растягивающих напряжений вдоль оси z (рис. 9, a) под КТ возможна локализация дислокационной призматической петли внедрения. Эта петля уменьшит суммарные напряжения и упругую энергию

в системе. Этот вывод можно обобщить для всех подобных систем, в которых параметр решетки материала КТ больше параметра решетки материала подложки. Как влияет на этот вывод соотношение между упругими модулями, предстоит исследовать в дальнейшем.

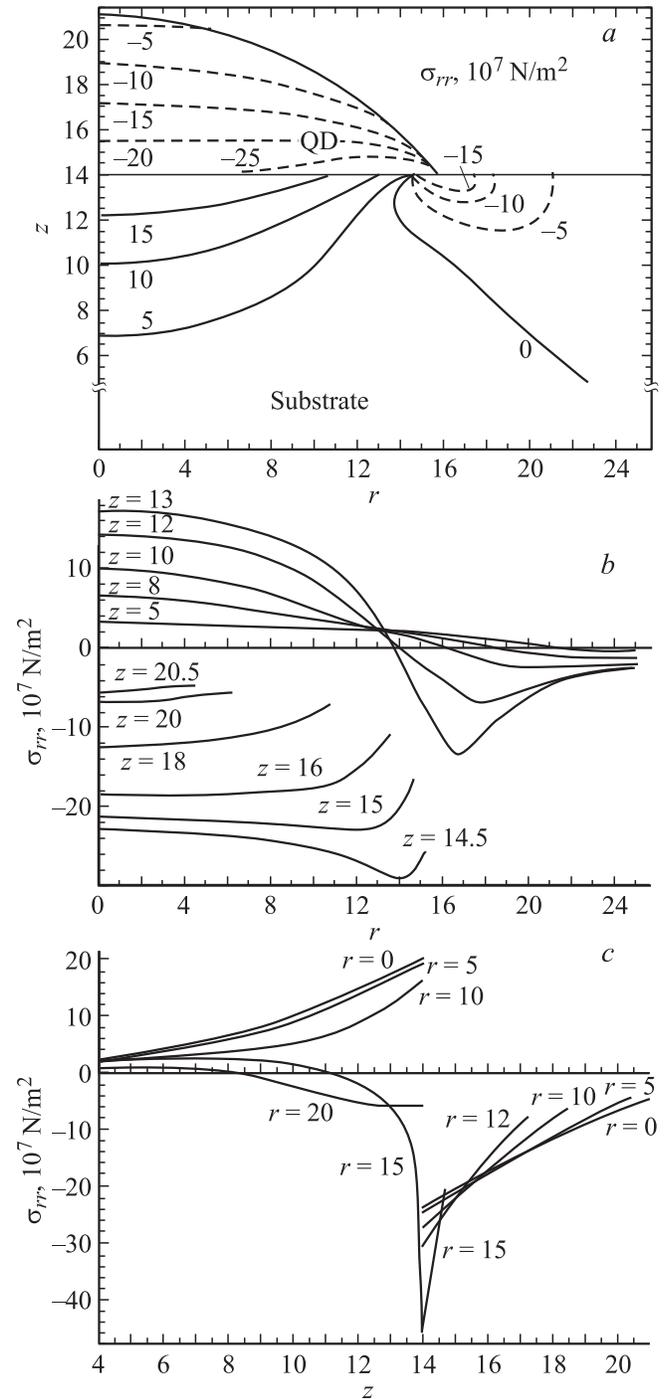


Рис. 7. Компонента механических напряжений σ_{rr} в InSb-островке (QD) и InAs-подложке. a — карта изолиний σ_{rr} , b — зависимости напряжений от радиальной координаты r при $z = \text{const}$, c — зависимости напряжений от координаты z при $r = \text{const}$. Все линейные величины выражены в произвольных единицах. Форма островка — сегмент сфероида с $\delta = 0.22$.

3. Электронно-микроскопическое изображение квантовой точки-островка

3.1. Уравнения динамической теории контраста для сильно искаженных островков. Расчет ЭМ-изображения КТ и определение контраста на этом изображении были приведены на основе полей сме-

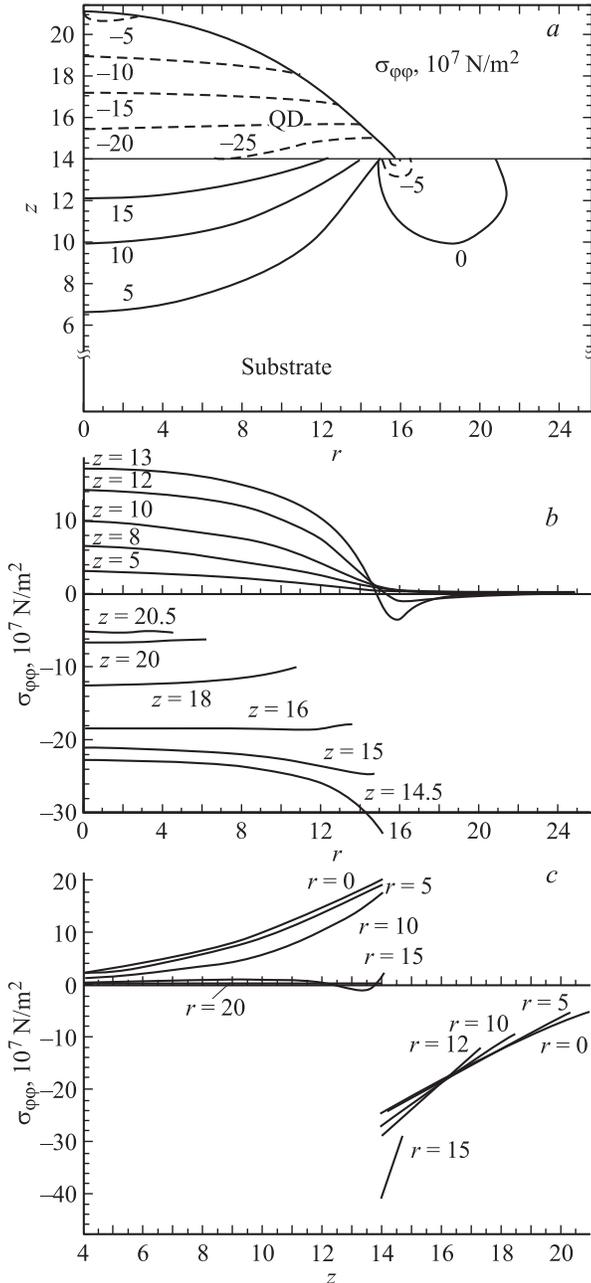


Рис. 8. Компонента механических напряжений $\sigma_{\phi\phi}$ в InSb-островке (QD) и InAs-подложке. *a* — карта изолиний $\sigma_{\phi\phi}$, *b* — зависимости напряжений от радиальной координаты r при $z = \text{const}$, *c* — зависимости напряжений от координаты z при $r = \text{const}$. Все линейные величины выражены в произвольных единицах. Форма островка — сегмент сфероида с $\delta = 0.22$.

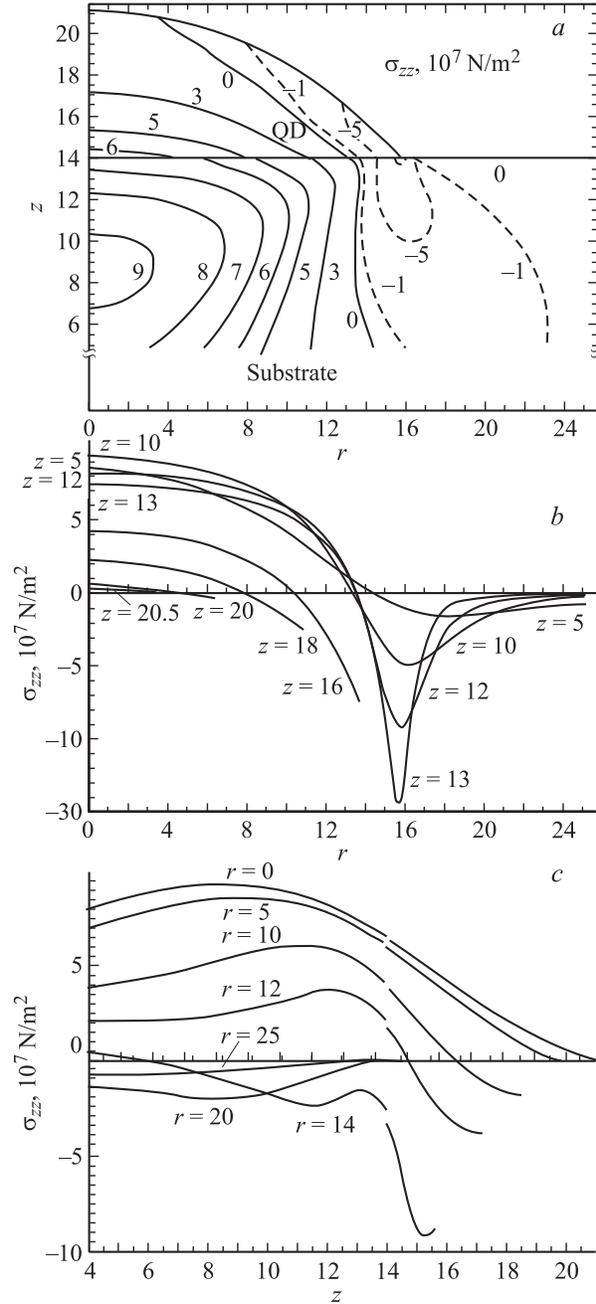


Рис. 9. Компонента механических напряжений σ_{zz} в InSb-островке (QD) и InAs-подложке. *a* — карта изолиний σ_{zz} , *b* — зависимости напряжений от радиальной координаты r при $z = \text{const}$, *c* — зависимости напряжений от координаты z при $r = \text{const}$. Все линейные величины выражены в произвольных единицах. Форма островка — сегмент сфероида с $\delta = 0.22$.

щений КТ с помощью уравнений динамической теории контраста, записанных в следующей форме [20]:

$$\begin{cases} \frac{d\Phi_0(z')}{dz'} = \frac{\pi i}{\xi_g} \Phi_g(z') \exp[2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}], \\ \frac{d\Phi_g(z')}{dz'} = \frac{\pi i}{\xi_g} \Phi_0(z') \exp[-2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}] + 2\pi i s \Phi_g(z'), \end{cases} \quad (7)$$

где Φ_0 — комплексная амплитуда прямой электронной волны, Φ_g — комплексная амплитуда дифрагированной

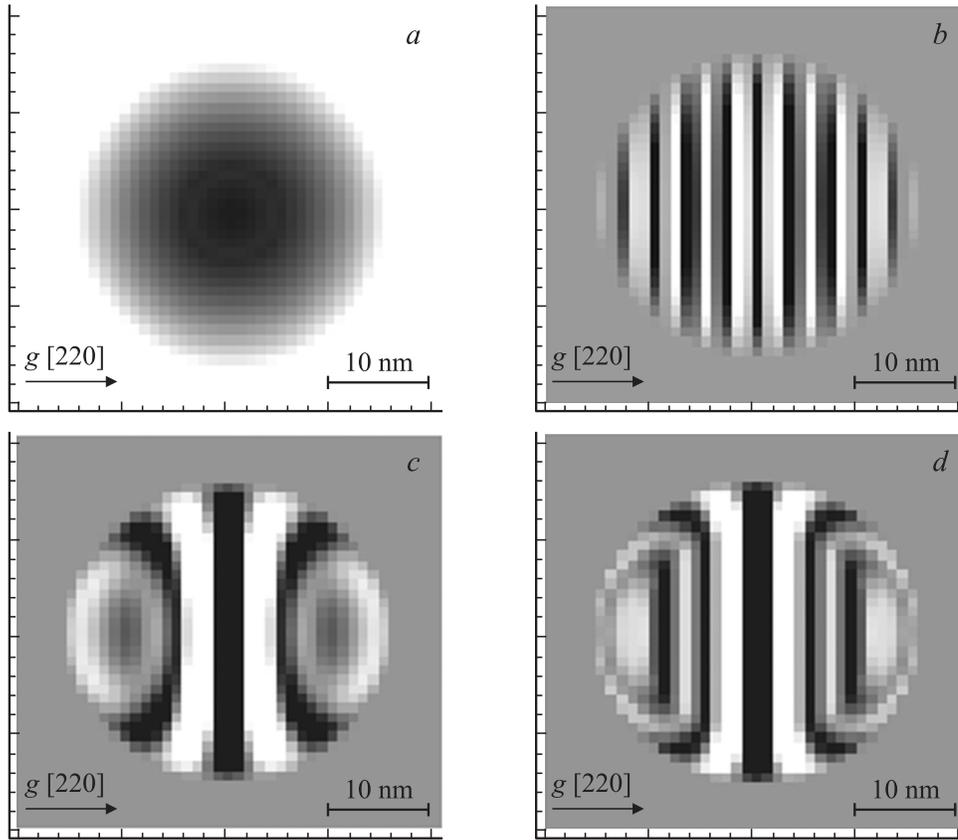


Рис. 10. Светлопольные ЭМ-изображения островков на InAs-пленке. *a* — неискаженный когерентный InAs-островок в форме сферического сегмента, *b* — неискаженный некогерентный InSb-островок в форме сферического сегмента, *c* — когерентный InSb-островок в форме сферического сегмента, *d* — когерентный InSb-островок в форме усеченного сегмента. Параметры, использованные для расчета, приведены в тексте.

электронной волны, \mathbf{g} — дифракционный вектор, \mathbf{u} — вектор поля смещений в системе, z — координата по оси, вдоль которой направлен волновой вектор прямой электронной волны. Для простоты решения системы (7) задан нулевой параметр девиации s . В рамках принятой геометрии моделируемого ЭМ-эксперимента ось z' направлена противоположно оси z (рис. 1). Граничные условия на поверхности падения электронной волны: $\Phi_0 = 1, \Phi_g = 0$. Дифракционный вектор \mathbf{g} лежит в плоскости XOY ; следовательно, в уравнениях (7) принимает участие только радиальная составляющая смещений u_r . Для построения ЭМ-изображения КТ в уравнения (7) необходимо подставить смещения u_r , дополненные смещениями в подложке. Сравнимые по величине смещения находятся под КТ и простираются на глубину порядка высоты КТ (см., например, рис. 4, *e* и 5, *e*). Кроме того, вблизи оси симметрии КТ радиальные смещения в подложке можно считать линейными по радиальной координате.

3.2. Псевдомуар на квантовой точке. Решение уравнений (7) с учетом приведенной ранее формулы (6) позволило определить интенсивности прямой

$I_0 = \Phi_0 \Phi_0^*$ и дифрагированной волн $I_g = \Phi_g \Phi_g^*$ и построить смоделированные ЭМ-изображения.

На рис. 10 показаны светлопольные изображения островков в форме сферического сегмента (*a–c*) и в форме усеченного сферического сегмента (*d*). В расчетах были выбраны следующие параметры: кристаллографическое направление вектора дифракции \mathbf{g} — $[220]$, экстинкционные длины в КТ и подложке $\xi_{g[220]}^{(\text{InSb})} = 57.3186 \text{ nm}$ и $\xi_{g[220]}^{(\text{InAs})} = 59.9055 \text{ nm}$ соответственно, толщина пленки 43 nm . Геометрические размеры всех островков составляли $\delta = 0.22$. Видно, что картина псевдомуара в полной мере выражена на усеченном островке (рис. 10, *d*). Таким образом, параллельные полосы псевдомуара указывают на то, имеет ли островок плоскую верхушку или нет.

3.3. Зависимость расстояния между полосами псевдомуара от характеристического отношения δ . Расстояние между полосами псевдомуара Δ зависит от характеристического отношения δ . На рис. 11, *a* представлена зависимость расстояния между полосами псевдомуара в центральной части усеченного островка от характеристического отношения δ для системы InSb/InAs.

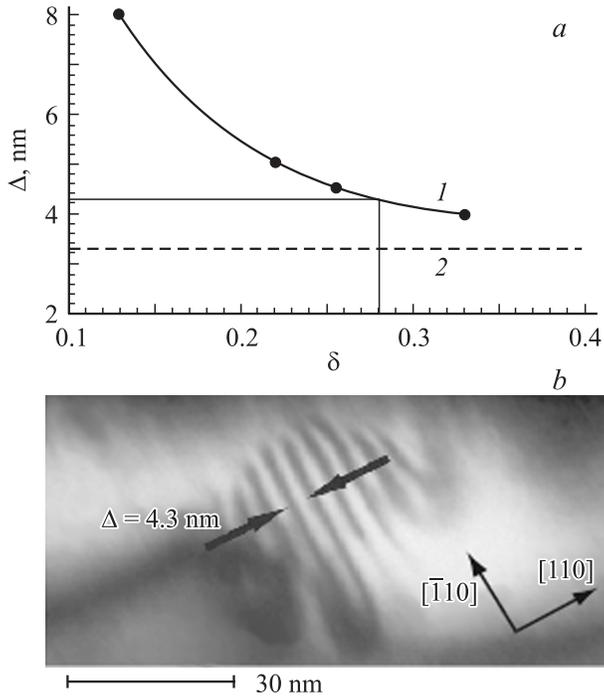


Рис. 11. *a)* Зависимость периода псевдомуара Δ от характеристического отношения δ геометрических размеров InSb-островка на InAs-пленке: *1* — зависимость $\Delta(\delta)$, *2* — величина периода муара для полностью некогерентных решеток островка и пленки. Параметры расчетов соответствуют указанным для рис. 10. *b)* Экспериментально наблюдаемое ЭМ-изображение InSb-островка.

Отметим, что можно значительно упростить вычисления, представив радиальные смещения, по крайней мере ближе к центральной оси островка, в виде простой зависимости (6) (с учетом изменения оси координат z на z'). Для сравнения на рис. 11, *b* представлен экспериментально наблюдаемый псевдомуар на КТ с расстоянием между линиями $\Delta = 4.3$ nm. На зависимости $\Delta(\delta)$ это расстояние соответствует характеристическому отношению $\delta = 0.28$. Это хорошо согласуется с величиной параметра $\delta_{\text{exp}} \approx 0.3$, которая была получена ЭМ-просвечиванием поперечного среза системы InSb/InAs.

4. Дислокационная релаксация напряжений в системе с квантовой точкой-островком

Распределение продольной компоненты напряжений σ_{zz} (рис. 9, *a*) позволяет предполагать возможность существования дислокационной призматической петли внедрения в подложке, а именно в области максимальных растягивающих напряжений σ_{zz} или в области, близкой к ней. При этом петля параллельна интерфейсу и соосна КТ.

Запишем условие существования дислокационной петли в системе, используя энергетический критерий,

$$E_{QD} \geq E_{QD} + E_{\text{loop}} + E_{QD-\text{loop}}, \quad (8)$$

где E_{QD} — энергия КТ, E_{loop} — энергия петли в системе, $E_{QD-\text{loop}}$ — энергия взаимодействия КТ и петли в системе.

Оценим энергию петли E_{loop} в системе. Энергия призматической петли в полупространстве с плоской свободной поверхностью известна (см., например, работу [21]). В нашей задаче свободная поверхность рельефна. Кроме того, существует внутренняя межфазная граница, которая вносит изменения в распределение упругих полей петли и в ее упругую энергию. Известно, что энергия дислокационной петли возрастает от нуля на свободной поверхности до своего значения в бесконечной среде уже на расстоянии порядка радиуса петли. Представим энергию призматической петли радиуса r_{loop} в непосредственной близости от поверхности под КТ в виде

$$E_{\text{loop}} = \gamma \frac{Gb^2 r_{\text{loop}}}{2(1-\nu)} \ln \frac{1.08 r_{\text{loop}}}{R_c}, \quad (9)$$

где γ — коэффициент, учитывающий близость свободной поверхности, b — величина вектора Бюргера петли, R_c — радиус ядра петли.

Энергия взаимодействия призматической петли внедрения и поля КТ $E_{QD-\text{loop}}$ рассчитывается по формуле

$$E_{QD-\text{loop}} = - \int_{S_{\text{loop}}} b \bar{\sigma}_{zz} \Big|_{z=z_{\text{loop}}} dS \approx - \bar{\sigma}_{zz} \Big|_{z=z_{\text{loop}}} \pi b a^2, \quad (10)$$

где S_{loop} — площадь петли.

Подставим выражения (9) и (10) в условие (8)

$$\gamma \frac{Gb}{2(1-\nu)} \ln \frac{1.08 r_{\text{loop}}}{R_c} - \bar{\sigma}_{zz} \Big|_{z=z_{\text{loop}}} \pi r_{\text{loop}} \leq 0. \quad (11)$$

Решим неравенство (11) относительно радиуса петли при следующих параметрах материала и петли: $G = 1.90 \cdot 10^{10}$ N/m², $\nu = 0.35$, $b = 0.6$ nm, $R_c = b/4$.

Рассмотрим два случая, накладывая на радиус петли дополнительное условие $r_{\text{loop}} \gg R_c$: 1) петля локализована в области максимальных растягивающих напряжений σ_{zz} (рис. 9, *a*): $\bar{\sigma}_{zz} \Big|_{z=z_{\text{loop}}} = 9 \cdot 10^7$ N/m², $\gamma = 1$, тогда из неравенства (11) получается, что $r_{\text{loop}} \geq 230$ nm; 2) петля находится непосредственно у интерфейса в области растягивающих напряжений и близко к свободной поверхности: $\bar{\sigma}_{zz} \Big|_{z=z_{\text{loop}}} = 6 \cdot 10^7$ N/m², $\gamma = 0.2$, $r_{\text{loop}} \geq 50-60$ nm.

Из этих оценок видно, что второй вариант наиболее реальный, если учесть, что именно в этом случае радиус петли близок к максимальному латеральному радиусу КТ. Если же взять несоответствие не 0.07, а больше, например, 0.15, то критический радиус петли составит величину порядка 20 nm, что соответствует типичным размерам КТ в различных гетероструктурах.

5. Заключение

Перечислим кратко результаты проведенных вычислений и оценок.

1) Найдено, что смещения узлов кристаллических решеток КТ относительно подложки по направлению вдоль границы их контакта происходят квазилинейно. Это справедливо для КТ с характеристическим отношением $\delta > \delta_{c1}$.

2) Показано, что распределение упругих полей практически не зависит от формы островка (для разумной кривизны его свободной поверхности) и от характеристического отношения δ при условии $\delta(\varepsilon^*) \geq \delta_{c1}(\varepsilon^*)$.

3) Обнаружено, что упругое поле в верхних слоях островка с $\delta(\varepsilon^*) \geq \delta_{c2}(\varepsilon^*)$ отсутствует.

4) Оценена возможность образования дислокационной петли внедрения вблизи КТ.

В рамках ЭМ-расчетов для системы InSb-островок/InAs-подложка получена зависимость расстояния между полосами псевдомуара от характеристического отношения $\Delta(\delta)$. Она позволяет определять характеристическое отношение островка простым измерением Δ , а следовательно, и высоту островка при известном латеральном размере. При известных же геометрических параметрах КТ эта зависимость позволяет оценить, в какой степени химический состав системы приближен к ожидаемому.

Список литературы

- [1] M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg. Phys. Rev. B **52**, 11 969 (1995).
- [2] H. Jiang, J. Singh. Physica E (Amsterdam) **2**, 614 (1998).
- [3] J.N. Davies. J. Appl. Phys. **84**, 1358 (1998).
- [4] J.H. Groenen, C. Priester, R. Carles. Phys. Rev. B **60**, 16 013 (1999).
- [5] J.N. Davies. Appl. Phys. Lett. **75**, 4142 (1999).
- [6] J.A. Barker, E.P. O'Reilly. Phys. Rev. B **61**, 13 840 (2000).
- [7] T. Benabbas, P. François, Y. Androussi, A. Lefebvre. J. Appl. Phys. **80**, 2763 (1996).
- [8] P.D. Miller, C.-P. Liu, W.L. Henstrom, J.M. Gibson, Y. Huang, P. Zhang, T.I. Kamis, D.P. Basile, R.S. Williams. Appl. Phys. Lett. **75**, 46 (1999).
- [9] X.Z. Liao, J. Zou, D.J.H. Cockayne, R. Leon, C. Lobo. Phys. Rev. Lett. **82**, 5148 (1999).
- [10] C.-P. Liu, J.M. Gibson, D.G. Cahill, T.I. Kamins, D.P. Basile, R.S. Williams. Phys. Rev. Lett. **84**, 1958 (2000).
- [11] J.P. McCaffrey, V.D. Robertson, S. Fafard, Z.R. Wasilewski, E.M. Griswold, L.D. Madsen. J. Appl. Phys. **88**, 2272 (2000).
- [12] J.P. McCaffrey, V.D. Robertson, P.J. Poole, B.J. Riel, S. Fafard. J. Appl. Phys. **90**, 1784 (2001).
- [13] Y. Androussi, T. Benabbas, A. Lefebvre. Ultramicroscopy **93**, 161 (2002).
- [14] Y. Androussi, T. Benabbas, S. Kret, V. Ferreira, A. Lefebvre. Phil. Mag. **87**, 1531 (2007).
- [15] N.A. Bert, A.B. Freidin, A.L. Kolesnikova, I.K. Korolev, A.E. Romanov. Phys. Status Solidi A **207**, 10, 2323 (2010).
- [16] F. Jonsdottir, D. Halldorsson, G.E. Beltz, A.E. Romanov. Mod. Simul. Mater. Sci. Eng. **14**, 1167 (2006).

- [17] P.В. Гольдштейн, В.А. Городцев, П.С. Шушпанников. Изв. РАН. Механика твердого тела **45**, 3, 7 (2010).
- [18] A.E. Romanov, T. Wagner. Scripta Mater. **45**, 325 (2001).
- [19] Electronic archive. New semiconductor materials. Characteristics and properties. Ioffe Physico-Technical Institute; <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM>.
- [20] П. Хирш, А. Хови, Р. Николсон, Д. Пэшли, М. Уэлан. Электронная микроскопия тонких кристаллов. М. Мир, (1968). 574 с.
- [21] A.L. Kolesnikova, A.E. Romanov. J. Appl. Mech. **71**, 3, 409 (2004).