

Расчет поверхностных характеристик и давлений квантовых точек InAs в матрице GaAs

© С.К. Губа^{*†}, В.Н. Юзевич^{*+†}

* Национальный университет „Львовская политехника“,
79013 Львов, Украина

+ Физико-механический институт им. Г. Карпенко Национальной академии наук Украины,
79060 Львов, Украина

(Получена 28 марта 2013 г. Принята к печати 11 ноября 2013 г.)

Изложена теоретическая модель для расчета энергетических характеристик поверхностей квантовых точек InAs в матрице GaAs(100). Модель основана на положениях неравновесной термодинамики и физики поверхностей. В работе представлены результаты расчета поверхностных энергетических и адгезионных физических величин, а также давлений в окрестности ребер квантовых точек InAs в матрице GaAs(100). С помощью соотношения Юнга установлены причины изгиба профиля нижней части квантовой точки. Полученные результаты могут быть использованы для оценки механизмов релаксации напряжений при самоорганизации квантовых точек InAs в матрице GaAs(100).

1. Введение

Достижения в развитии нанотехнологии и физики наноструктур привели к практической реализации оптоэлектронных приборов на базе массивов квантовых точек (КТ) [1]. Особенности электронной структуры КТ обусловлены не только конечностью их размеров, но и влиянием внутренних упругих деформаций [2–4]. Одним из путей образования упорядоченных рядов квантовых точек является самоорганизация наноструктур на поверхности кристалла. Это явление в большинстве полупроводниковых гетероэпитаксиальных систем и в частности системы InAs/In/GaAs(100) возникает за счет большого рассогласования параметра решетки ($f_n = 7\%$), которое приводит к релаксации упругих напряжений благодаря образованию упруго напряженных трехмерных островков — КТ InAs [5]. Явление релаксации напряжений исследовано для КТ, формирующихся в объеме полупроводника [6,7] или на его поверхности роста [8,9]. Островки формируются по механизму Странского–Крастанова. Кинетика роста и распределение напряжений в системе КТ–матрица влияет на размер, форму и расположение КТ в матрице [10,11].

Важными энергетическими характеристиками, от которых зависит кинетика роста КТ, являются поверхностная энергия и поверхностное натяжение. Экспериментально установлено, что важную роль в полупроводниковых наноструктурах играет изменение компоненты тензора поверхностных натяжений на ребрах КТ [12]. Для достижения оптимальных условий роста КТ InAs в матрице GaAs необходимо установить механизмы взаимосвязей между релаксацией упругих напряжений и поверхностной энергией системы InAs/In/GaAs(100) с их степенью упорядочения.

Достаточно обоснованный термодинамический анализ изменений энергетических характеристик поверхности

в процессе формирования КТ InAs в матрице GaAs отсутствует. Поэтому новизна проблематики заключается в использовании комплексного подхода физики поверхности, термодинамики неравновесных процессов физики наноструктур для изучения закономерностей изменений энергетических характеристик поверхности КТ и параметров, которые входят в уравнения состояния и граничные условия. В связи с этим для более глубокого понимания механизма самоорганизации КТ и их электронной структуры актуальной становится задача создания аналитической модели напряженной КТ. Эта модель должна описать следующие параметры КТ системы InAs/In/GaAs(100): поверхностную энергию, поверхностное натяжение, межфазную энергию, межфазное натяжение, энергию адгезионных связей, работу адгезии, давление в окрестности ребер квантовых точек InAs в матрице GaAs(100).

Пример использования термодинамического подхода и элементов физики поверхности для изучения энергетических характеристик поверхностных слоев твердых тел (полупроводников и металлов) дан в работе [13]. Общий подход к анализу поверхностных эффектов в полупроводниках и диэлектриках описан в работе [14]. Методология расчета энергии образования когерентно напряженного островка (КТ) согласно механизму Странского–Крастанова представлена в работе [1].

Ориентация на исследование поведения энергетических характеристик полупроводниковых материалов будет определять часть общей проблемы установления инвариантного поведения физических величин в формировании КТ с учетом изменений компонент тензора поверхностных натяжений на ребрах КТ. Поэтому цель данной работы заключается в описании модели, основанной на положениях неравновесной термодинамики и физики поверхностей, которая позволила рассчитать основные энергетические поверхностные и адгезионные параметры КТ в системе InAs/In/GaAs(100).

[†] E-mail: gubask@polynet.lviv.ua

^{††} E-mail: yuzevych@rambler.ru

2. Теоретическая модель

В основу исследований энергетических характеристик поверхности КТ InAs в матрице GaAs положены соотношения неравновесной термодинамики и физики поверхности твердого тела для полупроводников. Считаем, что поверхностная энергия, как и в диэлектрике, формируется в основном за счет поля механических напряжений и поля связанных электрических зарядов. Теория связанных электрических зарядов для поверхностных слоев диэлектриков представлена в работе [15]. Аналогичный подход применим к полупроводникам, поскольку роль свободных электрических зарядов в процессе формирования двойного электрического слоя и поверхностного натяжения на поверхности полупроводника не является определяющей.

2.1. Методика определения изменений поверхностного натяжения и поверхностной энергии

Для расчета поверхностного натяжения и поверхностной энергии рассмотрим макроскопическую модель поверхностного слоя твердого тела, в которой область $x > 0$ (V_1) занимает сплошную среду КТ InAs, а $x < 0$ (V_2) — подложка GaAs (x, y, z — декартовы координаты).

Соотношения термодинамической модели поверхностного слоя на поверхности полупроводникового материала представим в виде [13,15]

$$\operatorname{div} \hat{\sigma} + \rho \omega \mathbf{E}_{el} = 0, \quad (1)$$

$$\Delta \varphi = \rho C_\varphi \varphi / \varepsilon_0, \quad (2)$$

$$\sigma_h = \int_0^h \sigma_y dx, \quad \sigma_y = \sigma_z, \quad (3)$$

$$\sigma_y + p = 0 \text{ (для } x = h) \quad (4)$$

($p = 0.1$ МПа — атмосферное давление),

$$\gamma = \gamma_1 + \xi \gamma_2, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \gamma}{\partial k} = \frac{\partial (\gamma_1 + \xi \gamma_2)}{\partial k} = 0, \quad k = \sqrt{\frac{\rho C_\varphi}{\varepsilon_0}}, \quad (6)$$

$$\sigma_{ij} = \left[\left(K - \frac{2}{3} G \right) e - \alpha_i K \Delta T - K (\beta \varphi + \beta_c c) \right] \delta_{ij} + 2 G e_{ij}, \quad (7)$$

$$\omega_v = \rho \omega = \rho C_\varphi (\varphi - \gamma_i \Delta T) + \beta K e - \rho \eta_c c, \quad (8)$$

$$\mu_c = d_c c + d_t \Delta T + \beta_c K \frac{e}{\rho} \eta_c \varphi, \quad \Delta T = T - T_0, \quad (9)$$

$$\varphi = -\Phi_0, \quad \varphi + \psi = \text{const},$$

$$\sigma_x = -\frac{\varepsilon_0}{2} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^2 \text{ при } x = 0, \quad (10)$$

где σ_h — поверхностное натяжение, γ — поверхностная энергия (ПЭ), $\gamma_1 = \int_0^h w_1 dx$ — электрическая составля-

ющая ПЭ, которая отвечает связанным электрическим зарядам, $\gamma_2 = \int_0^h w_2 dx$ — механическая составляющая ПЭ;

$$w_1 = \frac{\varepsilon_0}{2} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^2, \quad w_2 = \frac{\sigma_x (\sigma_x - 4\nu \sigma_y)}{2E} + \frac{(1-\nu) \sigma_y^2}{E},$$

w_1, w_2 — плотности электрической и механической составляющих ПЭ, h — эффективная толщина поверхностного слоя, σ_{ij}, e_{ij} — компоненты тензоров напряжений $\hat{\sigma}$ и деформаций \hat{e} ($i, j = 1, 2, 3$), $\sigma_{11} = \sigma_x$, $\sigma_{22} = \sigma_y$; μ_c, c — химический потенциал и концентрация примеси; $\xi, \kappa, \alpha_i, \beta, \beta_c, C_\varphi, \gamma_i, \eta_c, d_c, d_t$ — физические характеристики материала; δ_{ij} — символы Кронекера; e — первый инвариант тензора деформаций; ρ — удельная плотность материала; ω_v, ω — пространственная и массовая плотности связанных электрических зарядов соответственно; $\varphi = \Phi - \Phi_0$ — отклонение модифицированного потенциала Φ связанных электрических зарядов от его равновесного значения Φ_0 в объеме тела на некотором расстоянии от поверхности, Ψ — скалярный потенциал напряженности электрического поля, $\psi = \Psi - \Psi_0$ — отклонение потенциала Ψ от его равновесного значения Ψ_0 ; $\mathbf{E}_{el} = \nabla \Psi = \operatorname{grad} \Psi$ — напряженность электрического поля; ε_0 — электрическая постоянная; $\Delta T = T - T_0$ — изменение температуры; $K = E/3(1-2\nu)$, $G = E/2(1+\nu)$. K и G — модули всестороннего сжатия и сдвига соответственно, E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона.

Соотношения (1)–(6) являются основанием системы уравнений для определения физических, $\xi, \kappa, \alpha_i, \beta, \beta_c, C_\varphi, \gamma_i, \eta_c, d_c, d_t$, и геометрической, h , характеристик поверхностного слоя.

Используя уравнение равновесия (1), соотношение (2), которое определяется из уравнений Максвелла, уравнения состояния (7)–(9) и граничные условия (10), механическое напряжение (и компоненты тензора поверхностного натяжения) в поверхностном слое находим, раскладывая их и деформации в ряды по малому параметру $b_s = \beta \Phi_0$.

Выражения (3), (5) соответствуют определению поверхностных натяжений σ_h и ПЭ γ , (6) — условию квазиравновесия поверхностного слоя (относительно перераспределений механических напряжений и связанных электрических зарядов).

2.2. Определение межфазной энергии и энергии адгезионных связей

Физические параметры переходного слоя на границе раздела КТ–подложка определяем из контактной задачи на основе уравнений, аналогичных уравнениям работы [16], которые являются обобщением соотношений (1)–(7).

Межфазные энергию W_m и натяжение σ_m представим в виде [16]

$$W_m = \gamma_3 + \xi_m \gamma_4, \quad \gamma_3 = \xi_0 \int_{-H}^H w_1 dx,$$

$$\gamma_4 = \xi_0 \int_{-H}^H w_2 dx, \quad \sigma_m = \int_{-H}^H \sigma_y dx, \quad (11)$$

где $\xi_m, z_m = \gamma_3/W_m$ — физические характеристики межфазного слоя, $2H$ — эффективная толщина межфазного слоя.

Условие равновесия межфазного слоя и граничные условия (при $x = +H$ и $x = -H$) запишем в виде [16]

$$\frac{\partial W_m}{\partial x} = \frac{\partial(\gamma_3 + \xi_m \gamma_4)}{\partial x} = 0,$$

$$\sigma_y^+ + p = 0 \quad (x = +H), \quad \sigma_y^- + p = 0 \quad (x = -H), \quad (12)$$

где индекс (+) отвечает параметрам КТ, а (–) — параметрам второй среды (подложки).

Представим граничные условия для границы раздела сред КТ–подложка как

$$\varphi_+ = \varphi_-, \quad \sigma_{x+} = \sigma_{x-}, \quad \sigma_{y+} = \sigma_{y-} \quad \text{при } x = 0. \quad (13)$$

Система уравнений (11)–(13) создает основу для определения физических характеристик $\xi_m, b = (b+, b-), \kappa = (\kappa+, \kappa-)$ и толщины $2H$ поверхностного слоя. Как видно из граничных условий (13), задача определения распределения связанных электрических зарядов и механических напряжений — контактная. Таким образом, система уравнений (11)–(13) является основой контактной задачи.

Работу адгезии A_{ad} и энергию адгезионных связей W_{ad} системы КТ–подложка определим на основе известных соотношений [17]:

$$A_{ad} = \sigma_{h+} + \sigma_{h-} - \sigma_m, \quad (14)$$

$$W_{ad} = \gamma_+ + \gamma_- - W_m. \quad (15)$$

3. Результаты и их обсуждение

Используем экспериментальные данные и табличные значения физических величин для неорганических материалов [18–21]. В табл. 1 сведены основные значения физических констант для материала КТ InAs, подложки GaAs, а также смачивающего слоя (СС) In. В табл. 1 N — число атомов материала в единице объема, ν — коэффициент Пуассона, E — модуль Юнга.

На основе расчетов с использованием метода разложения по малому параметру [14] (малый параметр — $b_s = b\Phi_0$) в рамках системы уравнений (1)–(7) в результате решения граничных задач для температуры плавления индия ($T = 430$ К) установлены значения физических характеристик материалов ξ, b, κ в уравнениях

Таблица 1. Физические характеристики GaAs, InAs, In

Материал	E , ГПа	ν	N , 1/м ³	σ_h , Н/м	γ , Дж/м ²
GaAs	85.06	0.35	$4.42 \cdot 10^{28}$	1.17	1.67
InAs	51.42	0.31	$3.96 \cdot 10^{28}$	0.76	1.08
In	11	0.46	$3.68 \cdot 10^{28}$	0.56	0.56

Таблица 2. Физические характеристики ξ, b, κ , плотность поверхностного заряда Q , его изменение $\delta Q, z_1$ для GaAs и InAs, In при $T = 300$ К

Материал	ξ	b , 1/В	κ , 1/м	Q , Кл/м ²	z_1	δQ , Кл/м ²
GaAs	12.10	0.476	$1.593 \cdot 10^{10}$	0.222	0.209	0.0098
InAs	10.12	0.394	$1.718 \cdot 10^{10}$	0.184	0.207	0.0188
In	1.816	1.618	$2.030 \cdot 10^{10}$	0.145	0.209	0.0062

состояния, а также плотности связанного поверхностного заряда Q для GaAs, InAs и СС In, приведенные в табл. 2. В табл. 2 $z_1 = \gamma_1/\gamma$. Отклонения плотности поверхностного заряда δQ связаны с отклонениями поверхностной энергии $\Delta\gamma = \pm 0.57$ (GaAs), ± 0.32 (InAs), ± 0.01 Дж/м² (In) [19].

Характеристики межфазных слоев на границах сред между GaAs и КТ InAs, GaAs и СС In, КТ InAs и СС In находим на основе методики работы [17]. При этом экспериментальное значение межфазного натяжения между SiO₂ и жидким Pb [17] ($\sigma_m = 0.786$ Н/м) использовано как тестовый пример для отладки компьютерной программы, с помощью которой были определены эти характеристики (табл. 3). В табл. 3 $z_A = \sigma_m/A_{ad}$, $z_W = W_m/W_{ad}$, $p_x = p_y = 0.1$ МПа — атмосферное давление, $p_x = p_y = 3.5$ ГПа — давление внутри КТ согласно (18). Данные верхних трех строк соответствуют параметрам при атмосферном давлении, последняя строка — при учете давления в КТ InAs.

Выражение $z_m(\text{InAs, In}) = \sigma_m/W_m = 0.996$ характеризует отношение межфазного натяжения и межфазной энергии на границе раздела КТ InAs и СС In. Отношение $z_m = \sigma_m/W_m$ — инвариантная характеристика границы раздела между КТ InAs и СС In. Для сравнения: $z_m(\text{GaAs, In}) = 0.97$, $z_m(\text{GaAs, InAs}) = 0.846$. Выражение $z_{ad}(\text{InAs, In}) = A_{ad}/W_{ad} = 0.6236$ характеризует соотношения между адгезионными характеристиками на границе раздела КТ InAs и СС In. Отношение $z_{ad}(\text{InAs, In}) = A_{ad}/W_{ad}$ — еще одна инвариантная характеристика границы раздела между КТ InAs и СС In. Для сравнения $z_{ad}(\text{GaAs, In}) = 0.569$, $z_{ad}(\text{GaAs, InAs}) = 0.546$.

Поскольку КТ InAs имеет пирамидальную форму [22], при рассмотрении КТ InAs в рамках наномасштаба оказывается, что ребра пирамиды не являются пересечением плоских граней, а в местах перехода имеют кривизну. Эту кривизну необходимо учитывать при росте КТ InAs в условиях самоорганизации.

Запишем формулу Лапласа для поверхностного натяжения σ_h и аналогичное соотношение для межфазного

Таблица 3. Характеристики межфазных слоев на границах раздела сред при $T = 430$ К (температура плавления индия) и разных значениях давления в КТ InAs

Межфазные слои на границах раздела сред (давление)	σ_m , Н/м	W_m , Дж/м ²	A_{ad} , Н/м	W_{ad} , Дж/м ²	z_A	z_W
GaAs и InAs ($p_x = p_y = 0.1$ МПа)	1.124	1.329	0.740	1.355	1.53	0.98
GaAs и In ($p_x = p_y = 0.1$ МПа)	1.082	1.116	0.615	1.081	1.76	1.033
InAs и In ($p_x = p_y = 0.1$ МПа)	0.762	0.765	0.525	0.842	1.451	0.908
InAs и In ($p_x = p_y = 3.5$ ГПа)	0.1635	0.6318	1.1235	0.9752	0.1455	0.6479

Таблица 4. Зависимости физических параметров W_m , σ_m , W_{ad} , A_{ad} , z_W , z_A от изменения давления в окрестности ребер пирамиды КТ InAs

R , нм	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0	1000
ΔP , МПа	380	304	253	217	190	169	152	0
P , ГПа	3.88	3.804	3.753	3.717	3.690	3.669	3.652	3.5
W_m , Дж/м ²	0.6174	0.6203	0.6222	0.6236	0.6246	0.6254	0.6260	0.6318
σ_m , Н/м	0.0985	0.1115	0.1202	0.1264	0.1310	0.1346	0.1375	0.1635
W_{ad} , Дж/м ²	0.9896	0.9867	0.9848	0.9834	0.9824	0.9816	0.9810	0.9752
A_{ad} , Н/м	1.1884	1.1755	1.1668	1.1606	1.1560	1.1524	1.1494	1.1235
z_W	0.6238	0.6286	0.6318	0.6341	0.6358	0.6371	0.6382	0.6479
z_A	0.0829	0.0948	0.1031	0.1089	0.1133	0.1168	0.1196	0.1455

натяжения σ_m :

$$\Delta P = \sigma_h \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad \Delta P = \sigma_m \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (16)$$

где ΔP — изменение давления в окрестности поверхности, главные радиусы кривизны которой R_1 и R_2 .

Если $R_2 \rightarrow \infty$ (в частности для ребра КТ), то

$$\Delta P = \sigma_h/R_1, \quad \Delta P = -\sigma_m/R_1. \quad (17)$$

Для примера рассмотрим КТ в виде пирамиды из материала InAs на подложке GaAs с учетом того, что между КТ InAs и подложкой находится СС жидкого In при температуре $T > 430$ К. Высота КТ InAs составляет $h = 7$ нм, угол наклона бокового ребра у основания пирамиды равен $\alpha = 26^\circ$ [22].

В окрестности бокового ребра поверхность выпуклая и, в соответствии с (17), дополнительное давление ΔP будет положительным, а в окрестности нижнего ребра форму поверхности проанализируем более детально. Давление в КТ InAs, поскольку частицы (атомы) КТ деформированы, найдем согласно формуле [23,24]

$$P_{QD} = \frac{2}{3} \frac{E}{1-\nu} f_n = \frac{2 \cdot 51.42 \cdot 10^9}{3 \cdot 1 - 0.31} \cdot 0.07 = 3.5 \cdot 10^9 \text{ Па}, \quad (18)$$

где $f_n = 0.07$ — параметр несоответствия между параметрами решеток GaAs и InAs.

Допустим, что изменения давления в окрестности ребер КТ не превышают $0.1 P_{QD}$. С использованием соотношения (17) рассчитаны зависимости дополнительного давления ΔP , межфазной энергии W_m , а также инвариантного параметра z_W от радиуса кривизны R в окрестности ребер квантовых точек. Полученные зависимости нелинейны (рис. 1). Рассчитанные значения физических

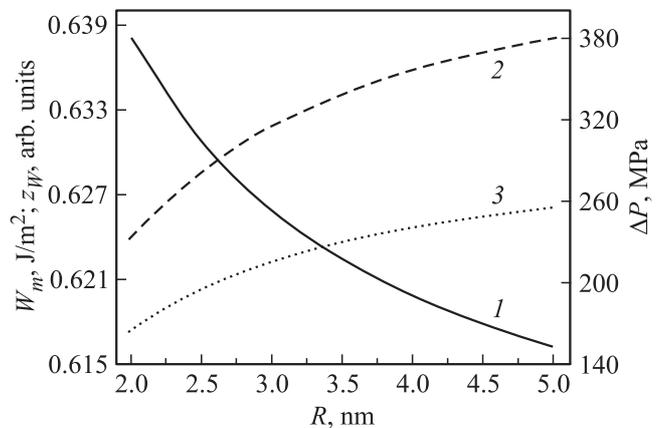


Рис. 1. Зависимости дополнительного давления ΔP (1), инвариантного параметра z_W (2), межфазной энергии W_m (3) от радиуса кривизны R в окрестности ребер квантовых точек InAs.

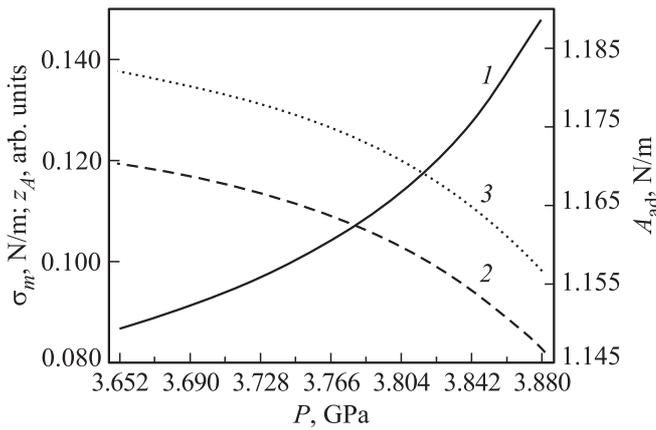


Рис. 2. Зависимости работы адгезии A_{ad} (1), инвариантного параметра z_A (2) и межфазного натяжения σ_m (3) от давления P в окрестности ребер квантовых точек InAs.

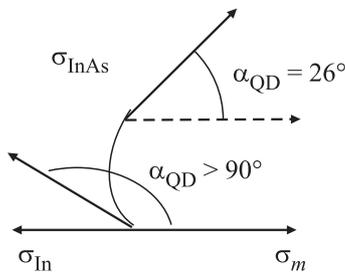


Рис. 3. Иллюстрация ориентации поверхностных, σ_{InAs} , σ_{In} , и межфазного, σ_m , натяжений в окрестности нижнего ребра пирамиды квантовой точки InAs с учетом изгиба профиля нижней части квантовой точки.

параметров W_m , σ_m , W_{ad} , A_{ad} , z_W , z_A в зависимости от изменения давления в окрестности ребер пирамиды КТ InAs представлены в табл. 4. На рис. 2 приведены рассчитанные зависимости межфазного натяжения σ_m , инвариантного параметра z_A и работы адгезии A_{ad} от давления P в окрестности ребер квантовых точек.

Для определения реальной формы КТ InAs в виде пирамиды используем информацию о связи между поверхностными и межфазным натяжением в окрестности нижнего ребра КТ. Межфазное натяжения σ_m в окрестности границы трех сред находим из соотношения Юнга [18]:

$$\sigma_{In} = \sigma_m + \sigma_{InAs} \cos \alpha_{QD}, \quad (19)$$

где α_{QD} — угол наклона бокового ребра у основания пирамиды, σ_{InAs} — поверхностное натяжение материала КТ InAs, σ_{In} — поверхностное натяжение СС In.

Подставляя числовые данные в (19), получим $\alpha_{QD} > 90^\circ$. Это означает, что угол, который формируется тремя поверхностными натяжениями в окрестности нижнего ребра КТ InAs, не равен $\alpha_{QD} = 26^\circ$ (т.е. углу наклона бокового ребра КТ InAs согласно работе [22]). Этот вывод следует из условия (19). Можно предположить, что реально во время формирования КТ InAs

возможна конфигурация боковых ребер (граней) в виде, изображенном на рис. 3.

В этом случае соотношение Юнга (19) выполняется:

$$\beta = 180^\circ - \alpha_{QD} = 1.28926 = 73.86^\circ \approx 74^\circ,$$

$$\sigma_{In} + \sigma_{InAs} \cos \beta = \sigma_m,$$

$$\alpha_{QD} = 180^\circ - 74^\circ = 106^\circ, \quad \Delta\alpha_{QD} = 106^\circ - 26^\circ = 80^\circ.$$

Полученный результат соответствует огромному давлению в КТ InAs: $P_{QD} = 3.5 \cdot 10^9$ Па. Оно (внутреннее давление) искривляет поверхность квантовой точки в окрестности линии раздела трех фаз. Изменение угла $\Delta\alpha_{QD} = 80^\circ$ характеризует деформацию (изгиб) поверхности квантовой точки.

Таким образом, из расчетных данных, которые описывают формирование КТ InAs в матрице GaAs, установлено, что в окрестности основания пирамиды боковое ребро КТ InAs изогнуто (поверхность выпуклая), результирующее давление будет $P_{QD} + \Delta P$ и оно определяет деформацию поверхности КТ InAs, которая отвечает изменению угла наклона $\Delta\alpha_{QD} = 80^\circ$.

Определены соотношения $z_{ad} = A_{ad}/W_{ad} = 0.996$, z_m , z_A , z_W , которые являются инвариантными характеристиками межфазного слоя на границе раздела КТ InAs и СС In. Угол наклона бокового ребра у основания пирамиды КТ InAs α_{QD} зависит от физических характеристик контактирующих фаз (от характеристик КТ InAs и СС In), и это установлено с помощью соотношения Юнга (19). Информация о значениях плотности поверхностного заряда Q и его изменения δQ является полезной для изучения реакционной способности поверхности.

4. Заключение

В работе развита теоретическая модель для расчета энергетических характеристик поверхностей КТ InAs в матрице GaAs. Изложенная теоретическая модель позволяет рассчитывать поверхностные энергетические, адгезионные физические величины, давление внутри и в окрестности ребер КТ InAs в матрице GaAs. На основе подхода неравновесной термодинамики рассматриваются изменения физических характеристик поверхностного слоя и параметров, которые входят в уравнения состояния, вызванные, с одной стороны, кривизной поверхности, которая отвечает ребрам, с другой — общей деформацией КТ. Учтено, что КТ в квазиравновесном состоянии соответствует определенной упругой энергии объемной части и приповерхностного слоя [14].

Полученные результаты дают возможность исследовать (анализировать) характеристики межфазных слоев на границе раздела КТ–СС In, СС In–GaAs, КТ–GaAs (подложка). Определены значения плотности поверхностного заряда на границах поверхностей и его изменения в результате взаимодействия контактирующих сред, что является необходимым для оценки реакционной

способности межфазной поверхности. Рассчитаны компоненты тензора поверхностных натяжений на ребрах КТ соответственно модельным представлениям системы GaAs/In/InAs.

Полученные результаты могут быть использованы для анализа — определения общих закономерностей изменений параметров КТ в матрице GaAs(100). Кроме того, они полезны при моделировании изменений энергетических характеристик поверхностных слоев, которые определяют механизмы взаимосвязей между релаксацией упругих напряжений и поверхностной энергией системы GaAs/In/InAs. Дальнейшее развитие модели связано с учетом роли поверхностных энергетических, адгезионных характеристик КТ в описании кластеров с дислокациями [24], являющимися основными дефектами в гетероструктурах с КТ.

Список литературы

- [1] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Шукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алфёров, Д. Бимберг. ФТП, **32**, 385 (1998).
- [2] A.E. Romanov, P. Waltereit, J.S. Speck. J. Appl. Phys., **97**, 43 708 (2005).
- [3] Б.В. Новиков, Г.Г. Зегря, Р.М. Пелешак, О.О. Данькив, В.А. Гайсин, В.Г. Талалаев, И.В. Штром, Г.Э. Цырлин. ФТП, **42**, 1094 (2008).
- [4] В.П. Евтихийев, О.В. Константинов, А.В. Матвеевцев, А.Е. Романов. ФТП, **36**, 79 (2002).
- [5] О.П. Пчеляков, Ю.Б. Болховитянов, А.В. Двуреченский, Л.В. Соколов, А.И. Никифоров, А.И. Якимя, Б. Фойхтлендер. ФТП, **40**, 1153 (2006).
- [6] Н.А. Берт, А.Л. Колесникова, А.Е. Романов, В.В. Чалдышев. ФТТ, **44**, 2139 (2002).
- [7] А.Л. Колесникова, Ф.Е. Романов, В.В. Чалдышев. ФТТ, **49**, 633 (2007).
- [8] K. Tillmann, A. Foster. Thin Sol. Films, **368**, 93 (2000).
- [9] V.J. Spencer, J. Tersoff. Appl. Phys. Lett., **77**, 2533 (2000).
- [10] В.Г. Дубровский. ФТП, **40**, 1153 (2006).
- [11] Р.М. Пелешак, С.К. Губа, О.В. Кузык, И.В. Курило, О.О. Данькив. ФТП, **47**, 324 (2013).
- [12] V.A. Shchukin, N.N. Ledentsov, P.S. Kop'ev, D. Bimberg. Phys. Rev. Lett., **75**, 2968 (1995).
- [13] С.К. Губа, В.М. Юзевич, И.В. Курило. Вестн. Нац. ун-та „Львовская политехника“. Элементы теории и приборы твердотельной электроники, **569**, 103 (2006).
- [14] P.M. Soprunjuk, V.M. Yuzevich. *Diagnostics of materials and environments. Energetic characteristics of surface layers* (Lviv, 2005).
- [15] В.Н. Юзевич. В сб.: *Термодинамика необратимых процессов* (М., Наука, 1992) с. 163.
- [16] V.M. Yuzevich. Mater. Sci., **35**, 237 (1999).
- [17] Б.П. Комач, В.Н. Юзевич. ФТТ, **54**, 1335 (2012).
- [18] А. Адамсон. *Физическая химия поверхностей* (М., Мир, 1979).
- [19] П.И. Баранский, В.П. Клочков, И.В. Потыкевич. *Полупроводниковая электроника: Справочник* (Киев, Наук. думка, 1975).
- [20] I.V. Kurilo, S.K. Guba. Inorganic Mater., **47**, 819 (2001).
- [21] Н.В. Сибирёв, М.А. Тимофеева, А.Д. Большаков, М.В. Назаренко, В.Г. Дубровский. ФТТ, **52**, 1428 (2010).
- [22] Л.И. Горай, Н.И. Чхало, Г.Э. Цырлин. ЖТФ, **79**, 117 (2009).
- [23] О.В. Константинов, Е.Ю. Котельников, А.В. Матвеевцев, А.Е. Романов. Письма ЖТФ, **27** (16), 40 (2001).
- [24] М.Г. Мильвидский, В.В. Чалдышев. ФТП, **32**, 513 (1998).

Редактор Л.В. Шаронова

Simulation of surface characteristics and pressures of the quantum dots InAs in matrix GaAs

S.K. Guba*, V.N. Yuzevich*+

* Lviv Polytechnic National University, 79013 Lviv, Ukraine

+ Karpenko Physicomechanical Institute, National Academy of Sciences of Ukraine, 79601 Lviv, Ukraine

Abstract A theoretical model for calculation of energy surface characteristics of InAs quantum dots in the GaAs matrix is expounded. The model is based on the principles of nonequilibrium thermodynamics and physics of surfaces. In the article the results of calculation of the surface energy, adhesion physical quantities and pressures in the vicinity of ribs of InAs quantum dots in the GaAs(100) matrix are presented. Using the Young relation the reasons of the bending profile of the bottom of a quantum dot are established. The results of calculation can be used to estimate the mechanisms of tensions relaxation during the self-organization of InAs quantum dots in GaAs(100) matrix.