

# Связь электронных свойств квантовых точек InAs/GaAs, выращенных газофазной эпитаксией, с их структурой

© А.П. Горшков<sup>1</sup>, Н.С. Волкова<sup>2</sup>, Д.А. Павлов<sup>1</sup>, Ю.В. Усов<sup>1</sup>, Л.А. Истомин<sup>2</sup>, С.Б. Левичев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup> Научно-исследовательский институт химии Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

E-mail: gorshkovap@mail.ru

(Получена 25 апреля 2018 г. Принята к печати 7 мая 2018 г.)

Основываясь на комплексном исследовании структурных и электронных свойств квантовых точек InAs/GaAs, выращенных газофазной эпитаксией при атмосферном давлении, выбрана модель их строения в виде трех сопряженных основаниями усеченных пирамид, учитывающая диффузионное размытие состава со стороны основания и боковой поверхности, а также сегрегацию индия вблизи вершины. Установлено, что волновые функции носителей в основном состоянии локализованы в сравнительно небольшой области квантовой точки вблизи ее вершины.

DOI: 10.21883/FTP.2018.12.46750.29

## 1. Введение

Электронные характеристики квантовых точек (КТ) определяются их размером, формой и химическим составом. Несмотря на широкий спектр применения структур с КТ InAs/GaAs, в литературе не в полной мере присутствуют исследования, отражающие связь между структурой и электронными свойствами. Известна всего одна работа [1], в которой результаты экспериментальных исследований оптических свойств КТ InGaAs/GaAs, выращенных методом газофазной эпитаксии при пониженном давлении, посредством теоретического моделирования позволили уточнить данные о форме и составе КТ, полученные микроскопическими методами. В данной работе исследуются КТ InAs/GaAs, выращенные методом газофазной эпитаксии при атмосферном давлении. Этот метод является сравнительно простым и высокопроизводительным, что делает его применение экономически обоснованным при массовом производстве квантово-размерных структур. Другое преимущество метода — возможность получения КТ со сравнительно низкой энергией основного оптического перехода ( $E_0 \approx 0.95$  эВ при 300 К) даже в структурах с толстым покровным слоем GaAs, что важно для применения приборов на основе таких структур в оптоволоконных линиях связи. Существенное различие энергий КТ, исследованных в данной работе и в работе [1], указывает на различие их формы и состава. Таким образом, очевидно, что для КТ InAs/GaAs, выращенных газофазной эпитаксией при атмосферном давлении, необходимо получение самосогласованной информации о параметрах их строения и электронной структуре.

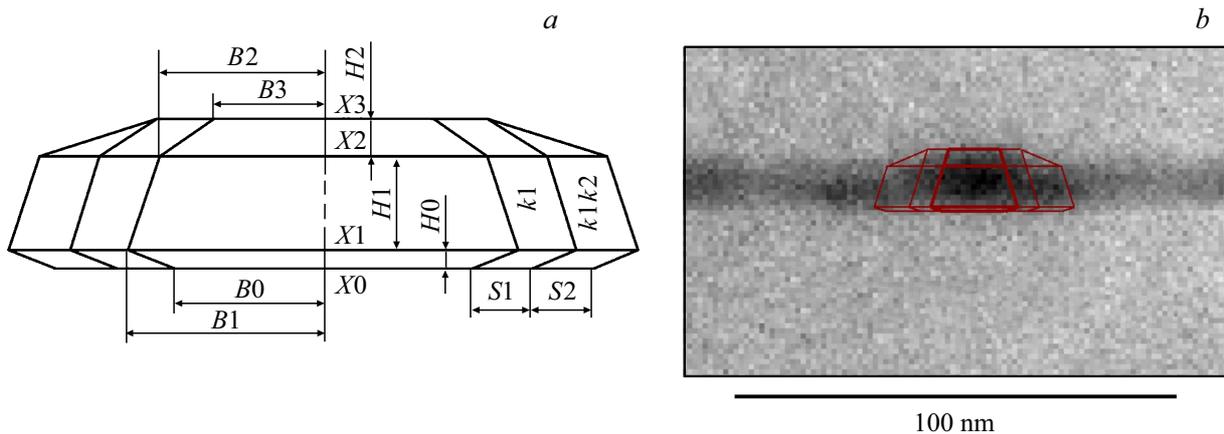
## 2. Методика эксперимента

Микроскопические исследования с использованием просвечивающего электронного микроскопа JEOL JEM-

2100F проводились на структуре с КТ InAs/GaAs, выращенной методом газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (ГФЭ МОС) при атмосферном давлении водорода с легированием слоя КТ примесью-сурфактантом — висмутом [2]. На поверхности (100) *s*-GaAs последовательно создавались буферный слой *n*-GaAs толщиной 0.6 мкм, слой КТ InAs и 0.2 мкм покровный слой GaAs. Эта структура являлась типичной для выращенных в НИФТИ ННГУ структур с КТ InAs/GaAs, электронные свойства которых достаточно полно экспериментально исследованы ранее [3–7].

Для верификации модели строения КТ, в отличие от работы [1], использовались не только энергии оптических переходов, но и параметры дипольного момента экситона в КТ, а также высота эмиссионного барьера для электронов, т.е. расстояние от основного электронного уровня в КТ до дна зоны проводимости матрицы GaAs. Энергия основного перехода наиболее чувствительна к размеру КТ в направлении роста. Этот параметр для КТ, выращенных ГФЭ МОС при атмосферном давлении с легированием висмутом, составляет  $E_0 \approx 0.95$  эВ [4–7]. Расстояние между основным и первым возбужденным оптическими переходами ( $E_1 - E_0$ ) зависит от латерального размера КТ [8] и в исследуемых КТ составляет  $E_1 - E_0 \approx 80$  мэВ [4–7]. По результатам исследования квантово-размерного эффекта Штарка [9] дипольный момент экситона в КТ, закрытых достаточно толстым покровным слоем, направлен от основания к вершине КТ (дырка располагается ближе к вершине КТ), а его величина соответствует расстоянию между центрами заряда электрона и дырки  $d \approx 0.5$  нм [4,7]. Высота эмиссионного барьера для электронов ( $E_{0c}$ ), определенная из исследований температурных зависимостей фоточувствительности от КТ, составляет  $\sim 200$  мэВ [5].

Расчет зонной структуры, энергетического спектра и огибающих волновых функций носителей в КТ, с целью определения вышеуказанных параметров для различных моделей строения КТ, выполнялся в программном пакете



**Рис. 1.** *a* — схематическое изображение модели КТ, *b* — электронно-микроскопическое изображение поперечного среза структуры с КТ и модель строения с оптимальными параметрами.

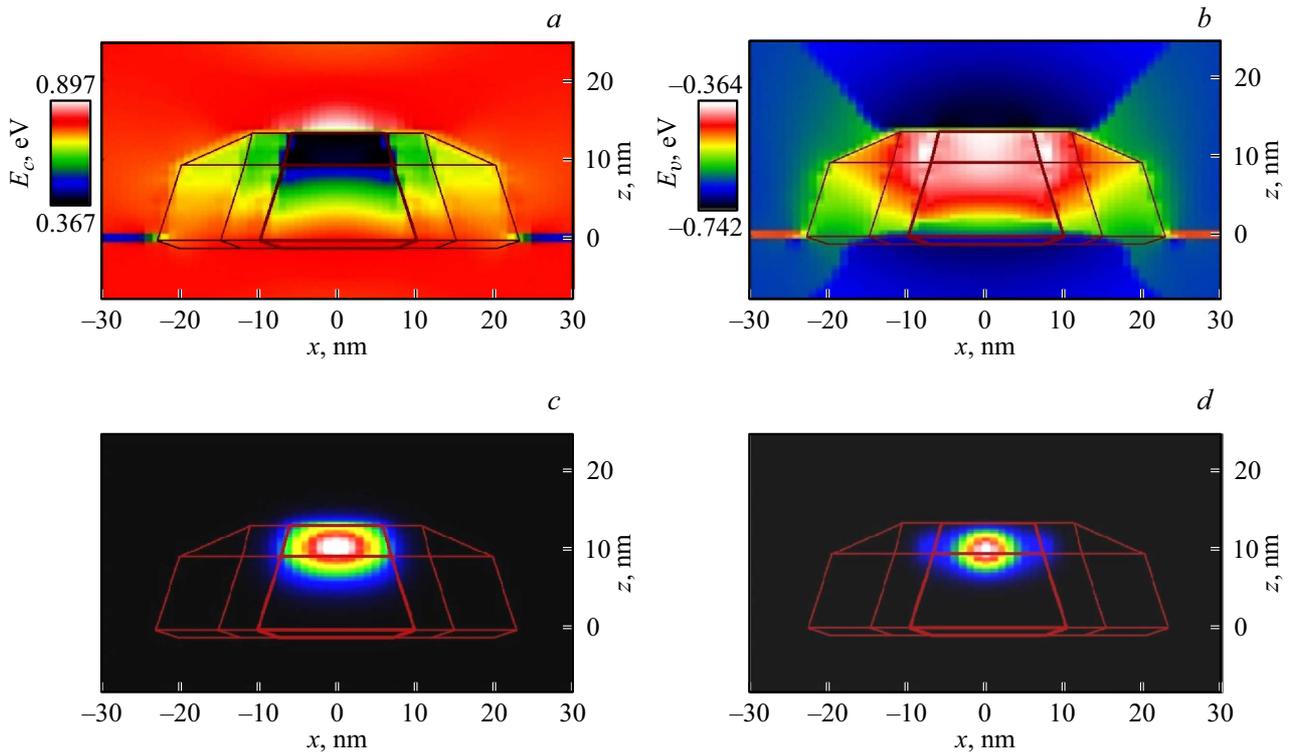
Nextnano<sup>++</sup> [10] в приближении эффективной массы. Так как гетероструктуры с КТ InAs/GaAs создаются на основе полупроводниковых материалов с различной постоянной решетки, в них возникают упругие деформации, которые влияют на положения краев зоны проводимости и валентной зоны. В связи с этим расчет состоял из трех этапов: решение задачи минимизации упругой энергии для получения распределения полей деформаций в структуре; расчет зонной структуры с учетом полученных упругих напряжений; решение уравнения Шредингера в приближении эффективной массы. Упругая задача решалась в рамках макроскопической теории упругости непрерывных сред для малых деформаций. При расчете положений краев зон в деформированной структуре считалось, что на зону проводимости влияют только гидростатические деформации, а на валентную зону тяжелых дырок еще и сдвиговые деформации [11].

### 3. Экспериментальные результаты и обсуждение

Для расчетов была выбрана модель строения КТ в виде трех сопряженных основаниями усеченных пирамид с переменным составом (рис. 1, *a*), в которой можно учесть следующие имеющие место в реальных выращенных методом газовой фазной эпитаксии КТ InAs/GaAs особенности: диффузионное размытие состава КТ InGaAs со стороны основания и боковой поверхности, а также сегрегацию In, приводящую к увеличению его концентрации у вершины КТ [12]. Каждая пирамида за исключением верхней состояла из центральной части и двух боковых частей шириной  $S_1$  и  $S_2$  с постоянным вертикальным градиентом состава, определяемым разностью соответствующих  $x$ . В боковых пирамидах, отражающих диффузионное размытие в латеральном направлении, содержание In на данной высоте последовательно уменьшалось в  $k_1$  и  $k_1 \cdot k_2$  раз по сравнению с его содержанием в центральной пирамиде. Нижняя

часть КТ отражает диффузионное размытие в подложку, верхняя, наиболее обогащенная In, — его сегрегацию на ростовой поверхности [13,14]. Размеры квадратных оснований ( $B_0, B_1, B_2, B_3$ ) и высот ( $H_0, H_1, H_2$ ) выбирались так, чтобы модель строения КТ не противоречила данным просвечивающей электронной микроскопии (рис. 1, *b*), из которых следует, что латеральный размер КТ составляет 45 нм, а высота — 15 нм. Заметим, что для КТ InAs/GaAs, полученных методом молекулярно-лучевой эпитаксии, характерны меньшие размеры и соответственно большая энергия основного оптического перехода [9].

Для различных комбинаций параметров данной модели проведен расчет энергетического спектра и волновых функций носителей заряда. Установлено, что в моделях с постоянным составом невозможно получение дипольного момента, направленного, как показывает эксперимент, от основания к вершине КТ. Для смещения дырки по направлению к вершине КТ необходим градиент содержания In в направлении роста. Подобный вывод об увеличении концентрации In у вершины КТ был сделан и в теоретической работе [15]. Также было установлено, что в моделях, не учитывающих неоднородность распределения In в плоскости роста, при латеральном размере КТ  $\sim 45$  нм, расстояние между основным и возбужденным оптическими переходами не может превышать  $\sim 35$  мэВ. Следовательно, для получения правильной величины  $E_1 - E_0 \approx 80$  мэВ центральная область КТ должна быть обогащена In значительно сильнее, чем периферия. В результате анализа множества различных конфигураций КТ, с учетом данных, полученных методом электронной просвечивающей микроскопии, найдены параметры строения КТ, обеспечивающие хорошее согласие результатов расчета с экспериментально определенными электронными параметрами КТ. При  $B_0 = 7$  нм,  $B_1 = 10$  нм,  $B_2 = 7$  нм,  $B_3 = 6$  нм,  $H_0 = 1$  нм,  $H_1 = 9.5$  нм,  $H_2 = 4$  нм,  $x_0 = 0$ ,  $x_1 = 0.1$ ,  $x_2 = 1$ ,  $x_3 = 1$ ,  $S_1 = 5$  нм,  $k_1 = 2$ ,  $S_2 = 8$  нм,



**Рис. 2.** Зона проводимости (а) и валентная зона (b) КТ в вертикальной плоскости, проходящей через центр КТ. Волновые функции электрона (c) и дырки (d) в основном состоянии в той же плоскости.

$k_2 = 2$  расчет дал следующие значения:  $E_0 = 0.944$  эВ,  $E_1 - E_0 = 78$  мэВ,  $E_{0c} = 220$  мэВ,  $d = 0.39$  нм (дырка ближе к вершине КТ). Контур модели при указанных значениях параметров, наложенный на изображение КТ, полученное на просвечивающем электронном микроскопе в сканирующем режиме, приведен на рис. 1, b.

В данной КТ волновые функции электрона и дырки в основном состоянии локализованы в наиболее обогащенной In центральной части КТ вблизи вершины (16 нм в ширину и 8 нм в высоту), где глубина потенциальных ям, образованных зоной проводимости и валентной зоной, максимальна (рис. 2). Заметим, что в работе [12] был сделан аналогичный вывод о наличии в КТ обогащенного индием ядра.

## 4. Заключение

В работе установлено, что в КТ InAs/GaAs, выращенных методом газовой фазной эпитаксии при атмосферном давлении, для объяснения значений экспериментально определяемых электронных параметров необходимо неоднородное распределение индия, такое, что бы электрон и дырка в основном состоянии были локализованы в сравнительно небольшой области, находящейся вблизи вершины КТ.

Авторы выражают благодарность внс НИФТИ ННГУ Б.Н. Звонкову за выращивание структуры.

Работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства образования и науки РФ (4.8337.2017/БЧ).

## Список литературы

- [1] J. Shumway, A.J. Williamson, A. Zunger, A. Passaseo, M. DeGiorgi, R. Cingolani, M. Catalano, P. Crozier. *Phys. Rev. B*, **64**, 125302 (2001).
- [2] Б.Н. Звонков, И.А. Карпович, Н.В. Байдусь, Д.О. Филатов, С.В. Морозов. *ФТП*, **35** (1), 92 (2001).
- [3] I.A. Karpovich, S.B. Levichev, S.V. Morozov, B.N. Zvonkov, D.O. Filatov, A.P. Gorshkov, A.Yu. Ermakov. *Nanotechnology*, **13**, 445 (2002).
- [4] А.П. Горшков, И.А. Карпович, А.В. Кудрин. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, **5**, 25 (2006).
- [5] Н.С. Волкова, А.П. Горшков, Д.О. Филатов, Д.С. Абрамкин. *Письма ЖЭТФ*, **100**(3), 175 (2014).
- [6] Н.С. Волкова, А.П. Горшков, А.В. Здорвейцев, Л.А. Истомин, С.Б. Левичев. *ФТП*, **49** (12), 1640 (2015).
- [7] A.P. Gorshkov, N.S. Volkova, L.A. Istomin, A.V. Zdoroveishev, S. Levichev. *Solid State Commun.*, **240**, 20 (2016).
- [8] M. Grundmann, O. Stier, D. Bimberg. *Phys. Rev. B*, **52**, 11969 (1995).
- [9] P.W. Fry, I.E. Itskevich, D.J. Mowbray, M.S. Skolnick, J.J. Finley, J.A. Barker, E.P. O'Reilly, L.R. Wilson, I.A. Larkin, P.A. Maksym, M. Hopkinson, M. Al-Khafaji, J.P.R. David, A.G. Cullis, G. Hill, J.C. Clark. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 733 (2000).

- [10] <http://www.nextnano.com/nextnanoplus>.
- [11] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. J. Appl. Phys., **89**, 5815 (2001).
- [12] N. Liu, J. Tersoff, O. Baklenov, A.L. Holmes, Jr., C.K. Shih. Phys. Rev. Lett., **84**, 334 (2000).
- [13] Ch. Heyn, W. Hansen. J. Cryst. Growth, **251**, 140 (2003).
- [14] J.M. García, D. Granados, J.P. Silveira, F. Briones. Microelectron. J., **35**, 7 (2004).
- [15] W. Sheng, J.P. Leburton. Phys. Rev. B, **63**, 161301 (2001).

*Редактор А.Н. Смирнов*

### **The connection between the electronic properties of InAs/GaAs quantum dots grown by metal organic vapour phase epitaxy with their structure**

*A.P. Gorshkov<sup>1</sup>, N.S. Volkova<sup>2</sup>, D.A. Pavlov<sup>1</sup>,  
Yu.V. Usov<sup>1</sup>, L.A. Istomin<sup>2</sup>, S.B. Levichev<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

<sup>2</sup> Research Institute for Chemistry,  
Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** A model of InAs/GaAs quantum dots grown by metal organic vapour phase epitaxy at the atmospheric pressure was defined as three truncated pyramids coupled by bases. This model bases on a complex study of the structural and electronic properties of quantum dots and takes into account diffusion intermixing of In and Ga in lateral and vertical directions as well as the In segregation at the top. It was found that carrier ground state wave functions are localized in a relatively small area near the top of the quantum dot.