

Барические свойства квантовых точек InAs

© Б.В. Новиков⁺, Г.Г. Зебря^{*}, Р.М. Пелешак[†], О.О. Данькив[†], В.А. Гайсин⁺,
В.Г. Талалаев^{+•¶}, И.В. Штром⁺, Г.Э. Цырлин^{*×°}

⁺Институт физики им. В.А. Фока Санкт-Петербургского государственного университета,
198504 Санкт-Петербург, Россия

^{*}Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

[†]Дрогобычский государственный педагогический университет им. И. Франко,
82100 Дрогобыч, Украина

[•]Max-Planck Institute of Microstructure Physics,
06120 Halle, Germany

[×]Санкт-Петербургский физико-технический научно-образовательный комплекс Российской академии наук,
195220 Санкт-Петербург, Россия

[°]Институт аналитического приборостроения Российской академии наук,
190103 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 20 ноября 2007 г. Принята к печати 5 декабря 2007 г.)

В рамках модели деформационного потенциала рассчитаны барические зависимости энергетической структуры квантовых точек InAs в матрице GaAs. В предположении отсутствия взаимодействия между квантовыми точками, имеющими сферическую форму и одинаковые размеры, найдена зависимость барического коэффициента энергии излучательного перехода в квантовой точке от величины энергии. Подобная зависимость обнаружена также экспериментально в спектрах фотолюминесценции при всестороннем сжатии структур InAs/GaAs. Обсуждаются качественное согласие теории и эксперимента, а также возможные причины их количественного различия. Делается вывод о вкладе в это различие таких факторов, как дисперсия размеров, кулоновское взаимодействие носителей заряда и туннельное взаимодействие квантовых точек.

PACS: 73.21.La, 78.55.Cr, 78.67.Hc, 81.40.Tv

1. Введение

Успехи в развитии нанотехнологии и физики наноструктур привели в последние годы к практической реализации ряда оптоэлектронных приборов на основе массивов квантовых точек (КТ) [1–3]. Являясь квазинульмерным объектом, КТ имеет дискретный набор энергетических уровней, чувствительность которого к механическим напряжениям проявляется уже на стадии зарождения КТ в процессе самоорганизации [4]. Кинетика эпитаксиального роста и распределение напряжений в системе КТ–матрица влияют на размер, форму и расположение КТ в массиве [5,6]. В связи с этим для точного прогноза оптических и транспортных свойств массива КТ требуется построение аналитической модели, способной описать следующие физические явления:

— зависимость барического коэффициента энергии излучательного перехода между основными состояниями электрона и дырки КТ (K_{QD}) от размеров и формы наноструктур;

— влияние деформационно-индуцированной диффузии адсорбируемых атомов на форму и размер КТ;

— взаимодействие полей локальных механических напряжений с электронной подсистемой КТ–матрица и их влияние на профиль квантуемого потенциала, электронную структуру, распределение электронной плотности в когерентно-напряженной КТ и в ее окрестности;

— электронно-деформационный механизм поляризации КТ.

В данной статье представлены результаты исследования зависимости барических коэффициентов энергии излучательного перехода КТ InAs от их размеров для гетеросистемы InAs/GaAs.

В большинстве известных случаев принимается, что деформационные характеристики (модуль Юнга и коэффициент Пуассона) нанобъектов совпадают с соответствующими объемными характеристиками. Однако, как показали первые исследования фотолюминесценции (ФЛ) для системы КТ InAs/GaAs [7–9], находящейся в условиях всестороннего сжатия, барический коэффициент для КТ InAs отличается от барического коэффициента энергии излучательного перехода в объемном InAs ($K_{\text{InAs}} = 12$ мэВ/кбар). Более того, в работах [8,9] нами было показано, что барический коэффициент K_{QD} не является постоянной величиной, а зависит от энергии излучательного перехода E_0 , т.е. от размера КТ. Эта функция хорошо описывалась линейным приближением. Зависимость $K_{\text{QD}}(E_0)$ и ее близкий к линейному характер получили подтверждение в работах [10,11], в том числе при компиляции известных экспериментальных данных. Однако в некоторых случаях (молекулы и многослойные массивы КТ) нами наблюдались отклонения экспериментальных точек от линейной зависимости [12]. Это послужило стимулом для проведения теоретического расчета барических коэффициентов энергии излучательного перехода в КТ разного размера.

¶ E-mail: talalaev@mpi-halle.mpg.de

Известные теоретические подходы для напряженной КТ, основанные на использовании теории возмущений [13] и **кp**-метода [14], ограничивались получением зависимости энергии излучательного перехода E_0 от давления P и применялись в основном для описания X–Г-пересечения краев зоны проводимости, наступающего при высоких давлениях (42 кбар для КТ InAs). Первые попытки связать барический коэффициент K_{QD} с размерами КТ (с энергией пика ФЛ) предприняты в [11] с использованием модели Фрогли и в [15] на основе атомарной модели поля валентных сил.

Цель данной работы — описание в рамках модели деформационного потенциала экспериментально наблюдаемой зависимости $K_{QD}(E_0)$ и ее отклонений для КТ в системе InAs/GaS.

2. Модель гетеросистемы InAs/GaS с когерентно-напряженными квантовыми точками InAs

Рассматривается гетеросистема InAs/GaS с когерентно-напряженными КТ InAs сферической формы. Чтобы свести задачу с большим количеством КТ к задаче с одной КТ, принимается следующее приближение. Энергию попарного упругого взаимодействия КТ можно заменить энергией взаимодействия каждой КТ с усредненным полем упругой деформации $\sigma_{ef}(N - 1)$ всех остальных $(N - 1)$ КТ.

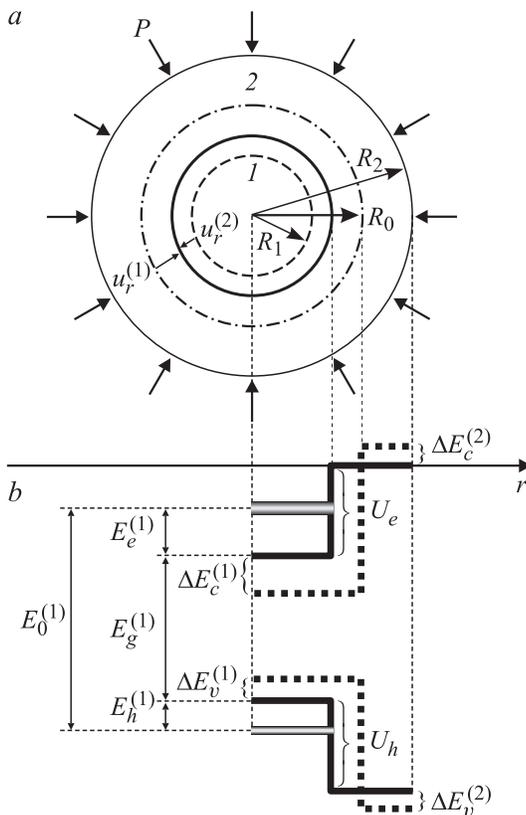


Рис. 1. Модель сферической КТ (а) и энергетическая схема структуры КТ InAs/матрица GaAs (b).

Поскольку постоянная решетки материала InAs больше, чем матрицы GaAs, то при гетероэпитаксии в пределах псевдоморфного роста InAs на GaAs материал InAs поддается деформации сжатия, а GaAs — деформации растяжения. Поэтому сферическую КТ можно представить упругим дилатационным микровключением в виде шара радиуса R_0 (штрихпунктирная линия на рис. 1, а), которая вставляется в сферическую полость радиуса R_1 в матрице GaAs (штриховая линия). Объем полости меньше объема микровключения на ΔV . Чтобы вставить такое сферическое микровключение, необходимо его сжать в радиальных направлениях и, напротив, матрицу GaAs необходимо растянуть в пределах сферы радиуса R_2 . Результат одновременного действия этих деформаций представлен сплошной линией на рис. 1, а.

3. Расчет компонент тензора деформации в сферической квантовой точке InAs и в матрице GaAs

Для определения компонент тензора деформации необходимо найти явный вид смещений атомов $u_r^{(1)}, u_r^{(2)}$ в материалах InAs и GaAs соответственно. С этой целью запишем уравнение равновесия [16]

$$\nabla \operatorname{div} u = 0 \tag{1}$$

со следующими граничными условиями для сферической КТ:

$$\begin{aligned} u_r^{(2)}|_{r=R_0} - u_r^{(1)}|_{r=R_0} &= f R_0, \\ |\sigma_{rr}^{(1)}|_{r=R_0} &= |\sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_0} + |P_L|_{r=R_0}, \\ \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_1} &= -P - \sigma_{ef}(N - 1), \quad P \gg \sigma_{ef}(N - 1). \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь R_0 — радиус КТ, R_1 — радиус полости в матрице GaAs, P — всестороннее давление; верхний индекс (1) относится к InAs (КТ), верхний индекс (2) — к GaAs (матрица). Лапласовское давление P_L есть

$$P_L = \frac{2\alpha}{R_0 - |u_r^{(1)}|}, \tag{3}$$

где α — поверхностная энергия КТ InAs [17]. Разница объемов упругого дилатационного микровключения и полости в матрице GaAs есть $\Delta V = 4\pi R_0^3 f$. Параметр f представляет собой сумму двух слагаемых,

$$f = f_1 + f_2.$$

Первое слагаемое (f_1) является параметром несоответствия деформаций, вызванных разными коэффициентами термического расширения материалов КТ ($\alpha_T^{(1)} = 4.52 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$) и матрицы ($\alpha_T^{(2)} = 5.73 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$):

$$f_1 = (\alpha_T^{(2)} - \alpha_T^{(1)})(T_K - T_0),$$

T_K — температура роста активной области структуры, T_0 — температура измерений. Второе слагаемое (f_2) является параметром несоответствия постоянных решеток

материалов КТ и матрицы ($a^{(1)}$ и $a^{(2)}$ соответственно):

$$f_2 = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(1)}} \approx 7\%.$$

Решение уравнения (1) в случае сферической КТ имеет вид [16,18]

$$u_r^{(1)} = C_1 r + \frac{C_2}{r^2}, \quad 0 \leq r \leq R_0, \quad (4)$$

$$u_r^{(2)} = C_3 r + \frac{C_4}{r^2}, \quad R_1 \leq r \leq R_2, \quad (5)$$

где R_2 — радиус сферы релаксации напряжений. Поскольку в точке $r = 0$ смещение должно быть конечным, в решении (4) положим $C_2 = 0$. Поле смещений определяет следующие компоненты тензора деформации:

$$\varepsilon_{rr}^{(1)} = C_1, \quad (6)$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)} = C_3 - \frac{2C_4}{r^3}, \quad (7)$$

$$\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)} = C_1, \quad (8)$$

$$\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(2)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(2)} = C_3 + \frac{C_4}{r^3}. \quad (9)$$

Механическое напряжение в материалах InAs и GaAs соответственно описывается выражениями

$$\sigma_{rr}^{(1)} = \frac{E_1}{(1 + \nu_1)(1 - 2\nu_1)} \times \left[(1 + \nu_1)\varepsilon_{rr}^{(1)} + \nu_1 \left(\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(1)} + \varepsilon_{zz}^{(1)} \right) \right], \quad (10)$$

$$\sigma_{rr}^{(2)} = \frac{E_2}{(1 + \nu_2)(1 - 2\nu_2)} \times \left[(1 + \nu_2)\varepsilon_{rr}^{(2)} + \nu_2 \left(\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(2)} + \varepsilon_{zz}^{(2)} \right) \right], \quad (11)$$

где ν_1, ν_2 — коэффициенты Пуассона, E_1, E_2 — модули Юнга материала КТ и окружающей матрицы соответственно. Они выражаются известным образом через упругие константы этих материалов. Коэффициенты C_1, C_3, C_4 находятся из решения системы уравнений (2) с учетом (4)–(11).

Компоненты тензора деформации зависят от радиуса КТ R_0 , формы КТ, всестороннего давления P и определяют энергетические смещения краев разрешенных зон (зоны проводимости и валентной соответственно), вызванные упругой деформацией (рис. 1, b):

$$\begin{aligned} \Delta E_c^{(i)}(\varepsilon^{(i)}) &= a_c^{(i)} \varepsilon^{(i)}, \\ \Delta E_v^{(i)}(\varepsilon^{(i)}) &= a_v^{(i)} \varepsilon^{(i)}, \end{aligned} \quad (12)$$

где $\varepsilon^{(i)} = \text{Sp} \hat{\varepsilon}^{(i)}$, $a_c^{(i)}$ и $a_v^{(i)}$ — константы гидростатического деформационного потенциала зоны проводимости и валентной зоны.

4. Расчет барических коэффициентов квантовых точек InAs в гетеросистеме InAs/GaAs. Зависимость от размеров

На рис. 1, b показана зависимость потенциальной энергии электрона и дырки от радиуса r в гетеросистеме InAs/GaAs с КТ InAs без учета (пунктирная линия) и с учетом (сплошная линия) действия всесторонней деформации, вызванной как несоответствием параметров решеток материала КТ и матрицы, различными термическими коэффициентами, так и внешним гидростатическим давлением P . Энергетические уровни электрона (E_e) и дырки (E_h) в основном состоянии расположены в потенциальных ямах U_e и U_h соответственно:

$$U_e = \begin{cases} -(|\Delta V_e(0)| - |a_c^{(1)} \varepsilon^{(1)}| - |a_c^{(2)} \varepsilon^{(2)}|), & 0 \leq r \leq R_0, \\ 0, & R_0 \leq r \leq R_1; \end{cases} \quad (13)$$

$$U_h = \begin{cases} -(|\Delta V_h(0)| - |a_v^{(1)} \varepsilon^{(1)}| - |a_v^{(2)} \varepsilon^{(2)}|), & 0 \leq r \leq R_0, \\ 0, & R_0 \leq r \leq R_1. \end{cases} \quad (14)$$

Здесь $\Delta V_e(0)$ и $\Delta V_h(0)$ — глубины потенциальных ям для электрона и дырки в КТ InAs в недеформированной гетероструктуре InAs/GaAs.

Энергия рекомбинационного перехода между основными состояниями электрона и дырки без учета их кулоновского взаимодействия есть

$$E_0^{(1)} = E_e^{(1)} + E_h^{(1)} + E_g^{(1)}, \quad (15)$$

где $E_g^{(1)}$ — ширина запрещенной зоны материала КТ InAs.

Барический коэффициент K_{QD} для КТ InAs в гетеросистеме InAs/GaAs определяется тремя составляющими:

$$\begin{aligned} K_{\text{QD}} &= \frac{\partial E^{(1)}}{\partial P} = \frac{\partial E_e^{(1)}}{\partial P} + \frac{\partial E_h^{(1)}}{\partial P} + \frac{\partial E_g^{(1)}}{\partial P} \\ &= \frac{\partial \varepsilon^{(1)}}{\partial P} \frac{1}{\partial \varepsilon^{(1)}/\partial R_0} \left[\frac{\partial E_e^{(1)}}{\partial R_0} + \frac{\partial E_h^{(1)}}{\partial R_0} + \frac{\partial E_g^{(1)}}{\partial R_0} \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь $\partial E_e^{(1)}/\partial P$ — составляющая барического коэффициента, вызванная сдвигом электронного уровня под действием гидростатического давления, $\partial E_h^{(1)}/\partial P$ — составляющая барического коэффициента, вызванная сдвигом дырочного уровня под действием гидростатического давления, $\partial E_g^{(1)}/\partial P$ — барический коэффициент ширины запрещенной зоны.

Для определения барического коэффициента K_{QD} (16) необходимо рассчитать энергетический спектр электрона и дырки в гетеросистеме InAs/GaAs с КТ InAs. Поскольку расчет будет проводиться нами в приближении эффективной массы, будем требовать выполнения таких физических условий, при которых геометрические

размеры КТ и области пространства между двумя соседними КТ значительно превышают размеры постоянных элементарных ячеек InAs (a_d) и GaAs (a_m), т. е. радиус сферической КТ $R_0 \gg a_d, a_m$. Для расчета необходимо решить уравнение Шредингера

$$H_{e,h}\Psi_{e,h}(\mathbf{r}) = E_{e,h}\Psi_{e,h}(\mathbf{r}) \quad (17)$$

с гамильтонианом

$$H_{e,h} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m_{e,h}^*(\mathbf{r})} \nabla + U_{e,h}(\mathbf{r}, R_0, P). \quad (18)$$

Эффективные массы электрона $m_{1e,2e}^*$ (дырки $m_{1h,2h}^*$) в КТ и в окружающей матрице считаем известными и равными объемным.

Решение уравнения Шредингера (17) в сферической системе координат имеет вид

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (19)$$

Здесь $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферические функции Лежандра [19]. Радиальные функции $R_{nl}(r)$ выражаются через сферические функции Бесселя:

$$R_{1nl}(r) = A j_l(k_{e,h}r) + B n_l(k_{e,h}r), \quad 0 \leq r \leq R_0, \quad (20)$$

$$R_{2nl}(r) = C h_l^{(1)}(i\chi_{e,h}r) + D h_l^{(2)}(i\chi_{e,h}r), \quad R_0 \leq r \leq R_1, \quad (21)$$

где

$$k_{e,h}^2 = \frac{2m_{1e,1h}^*}{\hbar^2} (|U_{e,h}| - |E_{nl}^{e,h}|), \quad (22)$$

$$\chi_{e,h}^2 = \frac{2m_{2e,2h}^*}{\hbar^2} |E_{nl}^{e,h}|, \quad (23)$$

а потенциальные энергии электрона и дырки $U_{e,h}$ определяются по формулам (13), (14). Условия непрерывности волновых функций и плотности потока вероятности на границе раздела КТ–матрица,

$$\begin{cases} R_1(r)|_{r=R_0} = R_2(r)|_{r=R_0}, \\ \frac{1}{m_{1e,1h}^*} \frac{dR_1(r)}{dr} \Big|_{r=R_0} = \frac{1}{m_{2e,2h}^*} \frac{dR_2(r)}{dr} \Big|_{r=R_0}, \end{cases} \quad (24)$$

вместе с условием регулярности функций $R_{nl}(r)$ при $r \rightarrow 0, r \rightarrow R_1$ и нормировкой определяют спектр энергий E_{nl} и волновые функции электрона и дырки в гетеросистеме InAs/GaAs с КТ InAs.

Таким образом, энергии основного состояния электрона и дырки в КТ определяются из следующего трансцендентного уравнения:

$$\begin{aligned} & k_{e,h} \operatorname{tg} \left(k_{e,h} R_0 - n \frac{\pi}{2} \right) \\ &= \chi_{e,h} \frac{m_{1e,1h}^*}{m_{2e,2h}^*} \frac{1 + \exp[2\chi_{e,h}(R_0 - R_1)]}{1 - \exp[2\chi_{e,h}(R_0 - R_1)]}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \end{aligned} \quad (25)$$

На основе (25) можно рассчитать с помощью (16) барические коэффициенты K_{QD} в зависимости от размеров КТ, учитывая, что

$$\frac{\partial E_0}{\partial R_0} = -\frac{\partial f / \partial R_0}{\partial f / \partial E_e}, \quad \frac{\partial E_h}{\partial R_0} = -\frac{\partial \varphi / \partial R_0}{\partial \varphi / \partial E_h}, \quad (26)$$

где

$$f = k_e \operatorname{tg} \left(k_e R_0 - n \frac{\pi}{2} \right) - \frac{\chi_e (m_{1e}^*/m_{2e}^*) [1 + e^{2\chi_e(R_0 - R_1)}]}{1 - e^{2\chi_e(R_0 - R_1)}},$$

$$\varphi = k_h \operatorname{tg} \left(k_h R_0 - n \frac{\pi}{2} \right) - \frac{\chi_h (m_{1h}^*/m_{2h}^*) [1 + e^{2\chi_h(R_0 - R_1)}]}{1 - e^{2\chi_h(R_0 - R_1)}}.$$

5. Численные расчеты и обсуждение результатов

Далее приводятся результаты теоретических исследований в рамках модели деформационного потенциала зависимости барического коэффициента КТ InAs (K_{QD}) от энергии рекомбинационного перехода (E_0), от радиуса КТ (R_0) и зависимости сдвига энергии перехода (ΔE_0) от величины гидростатического давления (P) для разных значений E_0 . Расчеты проведены при следующих значениях параметров (см. [17,20,21]): $a^{(1)} = 6.08 \text{ \AA}$, $a^{(2)} = 5.65 \text{ \AA}$; $C_{11}^{(1)} = 0.833 \text{ Мбар}$, $C_{12}^{(1)} = 0.453 \text{ Мбар}$, $C_{11}^{(2)} = 1.223 \text{ Мбар}$, $C_{12}^{(2)} = 0.571 \text{ Мбар}$; $\Delta V_c(0) = 0.6981 \text{ эВ}$, $\Delta V_v(0) = 0.3759 \text{ эВ}$; $a_c^{(1)} = -5.08 \text{ эВ}$, $a_c^{(2)} = -7.17 \text{ эВ}$, $a_v^{(1)} = 1 \text{ эВ}$, $a_v^{(2)} = 1.16 \text{ эВ}$; $E_g^{(1)} = 0.36 \text{ эВ}$, $E_g^{(2)} = 1.452 \text{ эВ}$; $m_{1e}^* = 0.057m_0$, $m_{2e}^* = 0.065m_0$, $m_{1h}^* = 0.41m_0$, $m_{2h}^* = 0.45m_0$; $\alpha^{(1)} = 0.657 \text{ Н/м}$.

На рис. 2 показана зависимость энергии рекомбинационного перехода от обратного радиуса КТ InAs в гетеросистеме InAs/GaAs. Как видно, энергия перехода E_0

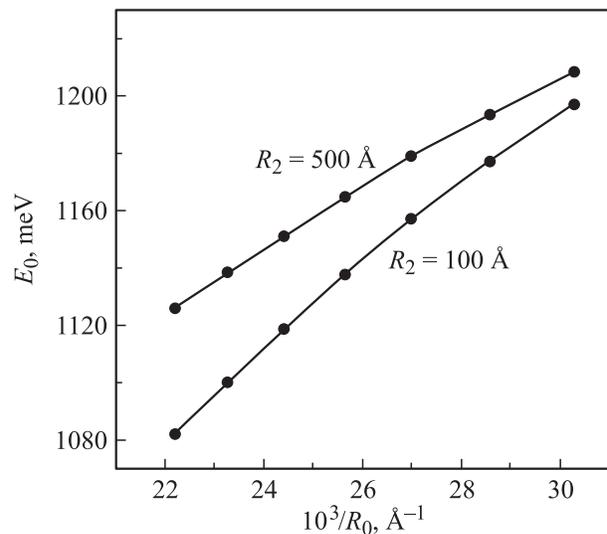


Рис. 2. Зависимости энергии рекомбинационного перехода E_0 от обратного радиуса КТ R_0 для значений радиуса окружающей матрицы $R_2 = 100$ и 500 \AA .

монотонно возрастает при уменьшении радиуса КТ R_0 и также возрастает при увеличении радиуса R_2 матрицы, в которой сформированы КТ. В частности, уменьшение радиуса КТ от 45 до 35 Å приводит к увеличению энергии перехода на 93.7 мэВ при $R_2 = 100$ Å и на 66.8 мэВ при $R_2 = 500$ Å.

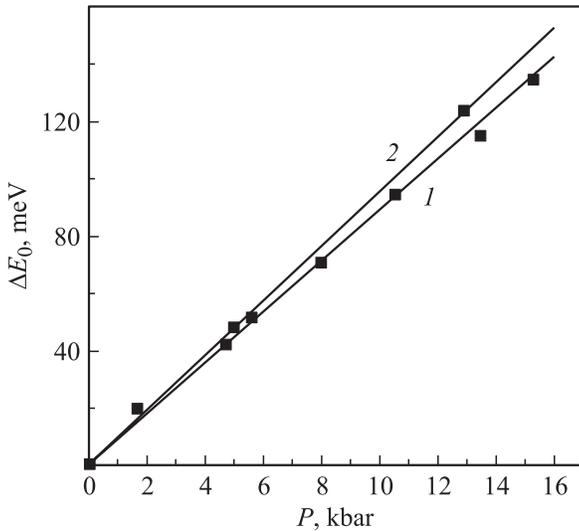


Рис. 3. Расчетные зависимости (сплошные линии) энергетического сдвига ΔE_0 КТ InAs от величины гидростатического давления P для значений энергии рекомбинационного перехода $E_0 = 1.13$ эВ ($R_0 = 42$ Å) (1) и 1.15 эВ ($R_0 = 39$ Å) (2). Точки — экспериментальный сдвиг полосы ФЛ с энергией $E_0 = 1.23$ эВ однослойного массива КТ при $T = 77$ К.

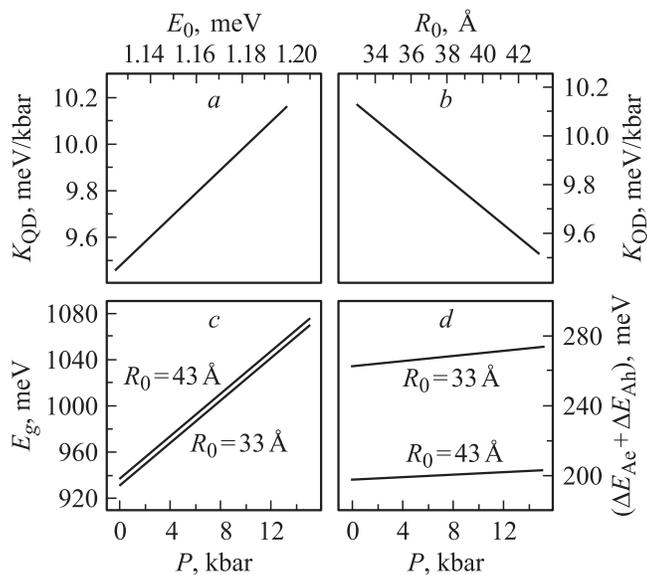


Рис. 4. Зависимости барического коэффициента в КТ InAs от энергии рекомбинационного перехода E_0 (a), от размера КТ R_0 (b), а также составляющая энергетического сдвига ΔE_0 , вызванная зависимостью ширины оптической щели E_g КТ от гидростатического давления (c), составляющая энергетического сдвига ΔE_0 , вызванная смещением электронного (ΔE_{Ae}) и дырочного (ΔE_{Ah}) уровней под действием гидростатического давления.

С помощью построенных на рис. 2 зависимостей был рассчитан сдвиг энергии перехода ΔE_0 для КТ InAs в напряженной гетероструктуре InAs/GaAs. Результаты расчетов, представленные графически на рис. 3, позволяют судить о возрастании рассматриваемого сдвига с увеличением гидростатического давления в интервале 0–15 кбар и о его уменьшении при увеличении размера КТ. Как известно, барический коэффициент энергии излучательного перехода массивного кристалла InAs равен $K_{InAs} = 12$ мэВ/кбар, в то время как барический коэффициент КТ InAs, рассчитанный в рамках описанной выше модели, равен $K_{QD} = 9.726$ мэВ/кбар при $R_0 = 42$ Å, т.е. значение барического коэффициента для КТ InAs меньше K_{InAs} на 19%.

Зависимости K_{QD} от энергии перехода E_0 и от размера КТ R_0 , рассчитанные с помощью формул предыдущего раздела, представлены на рис. 4, a и b. Теоретический расчет в рамках предложенной модели предсказывает линейный рост барического коэффициента КТ с повышением энергии рекомбинационного перехода. В соответствии с этим результатом увеличение размера КТ (т.е. сужение ее оптической щели) приводит к линейному спаду барического коэффициента K_{QD} . В частности, сдвиг энергии рекомбинационного перехода с 1.15 до 1.13 эВ, соответствующий увеличению размера КТ R_0 на 3 Å, приводит к спаду барического коэффициента на 0.1 мэВ/кбар.

Такой характер изменения барического коэффициента можно объяснить разным характером изменения его составляющих, представленным на рис. 4, c и d. При увеличении размера КТ наблюдается более быстрый спад компоненты барического коэффициента, вызванной сдвигом электронного и дырочного уровней под действием гидростатического давления (рис. 4, d), чем возрастание барического коэффициента ширины запрещенной зоны (рис. 4, c).

6. Экспериментальные результаты

Исследовались спектры ФЛ массивов КТ InAs, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложках GaAs. Массивы различались размерами (высотой) КТ и степенью их взаимодействия. Такие различия при выращивании на одной и той же установке обеспечивались вариациями технологических параметров (ростовая мода, скорость роста, температура и разориентация подложки), а также структурными особенностями массивов (плотность КТ в одном слое, число слоев с КТ). Измерения проводились при гидростатическом давлении до 16 кбар (1.6 ГПа) в камере высокого давления с мини-наковальнями из лейкосапфира. Камера с образцом помещалась в криостат, температура в котором понижалась до 77 К. Подробности методики даны в работе [8]. Фотолюминесценция возбуждалась аргоновым лазером с плотностью мощности излучения 0.2 кВт/см² и регистрировалась германиевым фотодиодом или фотоумножителем.

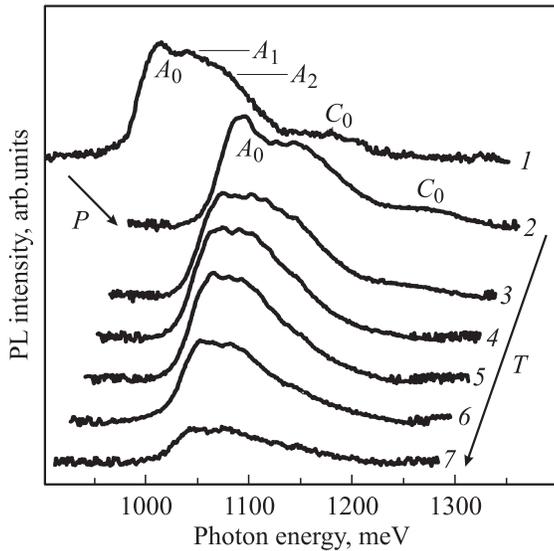


Рис. 5. Спектры фотолюминесценции (PL) 10-слойной структуры с КТ InAs (QDSL): 1 — без сжатия при 77 К, (2–7) — под давлением 16 кбар при температурах $T = 77, 100, 120, 160, 240, 300$ К соответственно.

На рис. 5 представлены оригинальные спектры ФЛ многослойных (стэкированных) массивов КТ (QDSL) в исходных условиях (атмосферное давление, 77 К) и при максимальном давлении 16 кбар в температурном интервале 77–300 К. Такой массив имеет ряд особенностей, исследованных нами ранее в [22]. В состав массива входят две размерные группы КТ: мелкие стэкированные КТ на внутренних слоях InAs (коротковолновая полоса C_0) и крупные ассоциированные КТ на верхних слоях InAs (длинноволновая полоса A_0 — переход между основными состояниями электрона и дырки; полосы A_1, A_2 — переходы с участием возбужденных состояний). Другой особенностью данного массива является высокая степень взаимодействия между КТ в соседних слоях — волновые функции соседних по вертикали КТ перекрываются за счет туннелирования. На рис. 5 хорошо заметен „синий“ сдвиг полос ФЛ, вызванный всесторонним сжатием, некоторое сужение полос, а также различие „синего“ сдвига для полос разного происхождения. Так, например, при давлении 16 кбар полоса C_0 „обычных“ КТ смещается почти на 100 мэВ, тогда как полоса ассоциированных КТ имеет синий сдвиг A_0 , не превышающий 85 мэВ. Зависимость синего смещения полос ФЛ от давления более полно представлена на рис. 3. Барические коэффициенты, рассчитанные при аппроксимации линейной зависимостью, составили: 10.4 мэВ/кбар для свободного экситона в GaAs, 6.1 мэВ/кбар для „обычных“ КТ и 5.2 мэВ/кбар для ассоциатов.

Аналогичным образом ранее были исследованы сжатые КТ InAs разного размера в однослойных массивах (OQD) [8,9,23] и молекулы КТ в двухслойных массивах (QDM) [24]. Из всего разнообразия КТ OQD (исследовано около 15 массивов) особо следует отметить изолированные КТ (IQD), возникающие на вициналь-

ных террасах при их высокой степени складирования с разрывами смачивающего слоя на ступеньках. Взаимодействие таких КТ практически отсутствует [22,25]. Напротив, взаимодействие КТ, образующих молекулу, выражено максимально [26].

Для всех измеренных структур с КТ разных размеров и типов была построена зависимость энергии излучательного перехода E_0 от давления P . В качестве примера на рис. 3 представлены экспериментальные данные зависимости $E_0(P)$ для полосы ФЛ с $E_0 = 1.23$ эВ однослойного массива КТ в сравнении с расчетными зависимостями для $E_0 = 1.13$ и 1.15 эВ. Видно, что линейная аппроксимация этой зависимости является очень хорошим приближением. На этом основании из наклона прямой были вычислены барические коэффициенты K_{QD} для всех исследованных КТ. Значения K_{QD} были сведены затем в зависимость K_{QD} от энергии E_0 , представленную на рис. 6. Для состояний КТ OQD, A_0 и A_1 проведена линейная аппроксимация. Для сопоставления эксперимента с теорией на рис. 6 приведена также прямая (сплошная линия), теоретически рассчитанная в данной работе (см. рис. 4, а). Сравнение показывает, что лишь данные для изолированных КТ IQD точно соответствуют расчетной прямой. Линейная аппроксимация для КТ OQD характеризуется тангенсом угла наклона, равным 15.5 бар^{-1} , тогда как теория предсказывает наклон 5.5 бар^{-1} . Основное состояние стэкированных КТ (C_0), вторые возбужденные состояния ассоциатов (A_2), а также все молекулярные термы ($M_{0,1,2}$) имели бари-

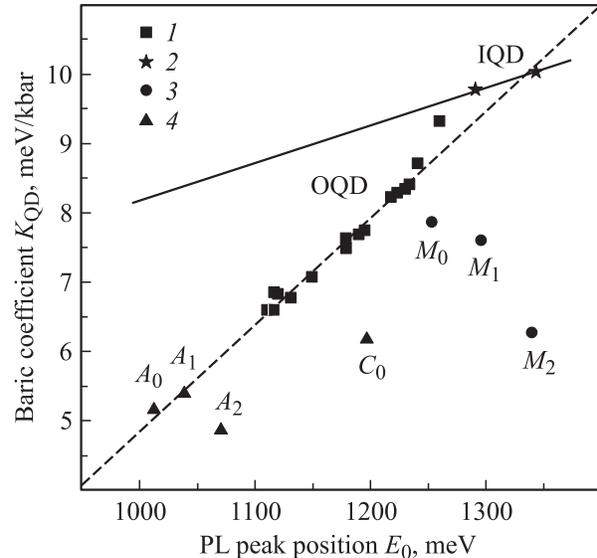


Рис. 6. Зависимость барического коэффициента K_{QD} от энергии излучательного перехода E_0 для различных массивов КТ: 1 — КТ OQD в однослойных массивах; 2 — изолированные КТ IQD на вицинальных подложках; 3 — молекулы КТ QDM в двухслойных массивах; 4 — стэки КТ InAs/GaAs (10 слоев, спейсер 8 нм), полоса C_0 — стэкированные КТ, полосы A_0, A_1, A_2 — ассоциированные КТ. Штриховая линия — линейная аппроксимация экспериментальных данных для полос ФЛ OQD, A_0 и A_1 . Сплошная линия — теоретический расчет (см. рис. 4, а).

ческие коэффициенты, смещенные в область меньших значений относительно данных для QD, A_0 и A_1 при их аппроксимации как прямой, так и параболы (рис. 6).

Несоответствие наклонов расчетной и экспериментальной прямых в зависимости $K_{QD}(E_0)$ можно объяснить допущениями, сделанными при проведении расчетов, а именно, на островам приписывались одинаковый размер и сферическая форма. Кроме того, при расчетах игнорировались кулоновское взаимодействие и наличие смачивающего слоя, что верно лишь для изолированных КТ.

Дисперсия КТ по размерам (по высоте) приводит к тому, что распределение носителей между КТ в массиве и, следовательно, контур полосы ФЛ при данной температуре определяются процессами обмена между КТ, т.е. их взаимодействием. Под действием всестороннего сжатия потенциальные барьеры и эффективные массы носителей повышаются, причем этот процесс идет интенсивнее для КТ меньшего размера, имеющих больший барический коэффициент. В результате этого носители перераспределяются в пользу все более возрастающей части глубоких потенциальных ям. Внешними проявлениями этого процесса являются: замедление „синего“ барического сдвига из-за появления „красной“ составляющей (уменьшение K_{QD}) и сужение полосы ФЛ. Оба эффекта наблюдались нами экспериментально (рис. 5 и 6). Похожее сужение полосы ФЛ наблюдали также авторы [27].

Отклонение экспериментальной зависимости $K_{QD}(E_0)$ у стэков и молекул КТ мы связываем с сильным взаимодействием таких состояний из-за высокой прозрачности барьера (спейсера) между соседними КТ. Возникающее туннелирование стимулирует эффективный обмен носителями. В результате этого „красная“ составляющая в барическом сдвиге становится более выраженной. Наблюдаемые отклонения являются по сути более сильным проявлением рассмотренного выше эффекта. Этот вывод соответствует результату, полученному в [28], где авторы наблюдали уменьшение „синего“ сдвига с ростом давления при слабом возбуждении в стэкированных КТ с очень тонким спейсером (3 нм). В рамках предложенной здесь модели этот результат соответствует экстремальному, доминирующему росту „красной“ составляющей в спектральном сдвиге ФЛ массива туннельно-связанных КТ.

7. Заключение

Таким образом, экспериментально исследованы барические зависимости ФЛ для массивов КТ с числом слоев, равным 1, 2 и 10. Для однослойных массивов подтверждена впервые обнаруженная ранее линейная зависимость барического коэффициента от энергии основного состояния КТ, а тем самым и от размера КТ. Развита теоретическая модель для сферических невзаимодействующих КТ в условиях всестороннего сжатия, дающая хорошее согласие с экспериментом для изолированных КТ. Дальнейшее развитие модели связывается

с учетом роли смачивающего слоя и кулоновского взаимодействия носителей в КТ. Значения барических коэффициентов для двуслойных массивов КТ (молекулы КТ), а также для мелких состояний в многослойных (стэкированных) массивах КТ существенно отклоняются от найденной линейной зависимости. Туннельное взаимодействие таких состояний будет учтено в дальнейшем при совершенствовании физической модели массива КТ в условиях всестороннего сжатия.

Данная работа была выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ, а также научной программы президиума РАН „Квантовые наноструктуры“.

Список литературы

- [1] В.П. Евтихийев, О.В. Константинов. ФТП, **36**, 79 (2002).
- [2] N.N. Ledentsov, V.A. Shchukin, T. Kettler, K. Posilovic, D. Bimberg, L.Y. Karachinsky, A.Y. Gladyshev, M.V. Maximov, I.I. Novikov, Y.M. Shernyakov, A.E. Zhukov, V.M. Ustinov, A.R. Kovsh. J. Cryst. Growth, **301**, 914 (2007).
- [3] V.M. Ustinov, A.E. Zhukov, A.Y. Egorov, N.A. Maleev. *Quantum dot lasers* (Oxford University Press, 2003).
- [4] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Шукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алфёров, Д. Бимберг. ФТП, **32**, 385 (1998).
- [5] V.A. Shchukin, D. Bimberg. Appl. Phys. A, **67**, 687 (1998).
- [6] В.Г. Дубровский, Ю.Г. Мусихин, Г.Э. Цырлин, В.А. Егоров, Н.К. Поляков, Ю.Б. Самсоненко, А.А. Тонких, Н.В. Крыжановская, Н.В. Берг, В.М. Устинов. ФТП, **38**, 342 (2004).
- [7] I.E. Itskevich, M. Henini, H.A. Carmona, L. Eaves, P.C. Main, D.K. Maude, J.C. Portal. Appl. Phys. Lett., **70**, 505 (1997).
- [8] В.А. Гайсин, Динь Шон Тхак, Б.С. Куликин, Б.В. Новиков, В.Н. Петров, В.М. Устинов, Г.Э. Цырлин. Вестн. СПбГУ, сер. 4, вып. 4 (№ 28), 120 (2000).
- [9] В.А. Гайсин, Динь Шон Тхак, Б.С. Куликин, Б.В. Новиков, В.Н. Петров, В.М. Устинов, Г.Э. Цырлин. Вестн. СПбГУ, сер. 4, вып. 2 (№ 12), 115 (2001).
- [10] F.J. Manjon, A.R. Goni, K. Syassen, F. Heinrichsdorff, C. Thomsen. Phys. Status Solidi B, **235**, 496 (2003).
- [11] B.S. Ma, X.D. Wang, F.H. Su, Z.L. Fang, K. Ding, Z.C. Niu, G.H. Li. J. Appl. Phys., **95**, 933 (2004).
- [12] V.A. Gaisin, V.G. Talalaev, B.V. Novikov, V.A. Shugunov, N.D. Zakharov, G.E. Cirlin, Y.B. Samsonenko, G.G. Zegrya, R.M. Peleschak, O.O. Dankiv, A.A. Tonkikh, V.A. Egorov, N.K. Polyakov, V.M. Ustinov. *Proc. 15th Int. Symp. „Nanostructures: Physics and Technology“* (Novosibirsk, Russia, 2007) p. 212.
- [13] G.H. Li, A.R. Goni, K. Syassen, O. Brandt, K. Ploog. Phys. Rev. B, **50**, 18 420 (1994).
- [14] S.I. Rybchenko, I.E. Itskevich, A.D. Andreev, J. Cahill, A.I. Tartakovskii, M.S. Skolnick, G. Hill, M. Hopkinson. Phys. Status Solidi B, **241**, 3257 (2004).
- [15] C. Kristukat, A.R. Goni, K. Potschke, D. Bimberg, C. Thomsen. Phys. Status Solidi B, **244**, 53 (2007).
- [16] К. Теодосиу. *Упругие модели дефектов в кристаллах* (М., Мир, 1085).
- [17] E. Pehlke, N. Moll, M. Scheffler. *Materials Theory*, **1**, 9607 012 (1996).
- [18] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости* (М., Мир, 1965).
- [19] З. Флюгге. *Задачи по квантовой механике* (М., Мир, 1974).

- [20] A. Qteish, R.J. Needs. Phys. Rev. B, **45**, 1317 (1992).
- [21] Chris G. Van de Walle. Phys. Rev. B, **39**, 1871 (1989).
- [22] V.G. Talalaev, B.V. Novikov, M.A. Smirnov, V.V. Kachkarov, G. Gobsch, R. Goldhahn, A. Winzer, G.E. Cirlin, V.A. Egorov, V.M. Ustinov. Nanotechnology, **13**, 143 (2002).
- [23] В.А. Гайсин, Динь Шон Тхак, Б.С. Кулинкин, Б.В. Новиков, В.Н. Петров, В.М. Устинов, Г.Э. Цырлин. Вестн. СПбГУ, сер. 4, вып. 1 (№ 4), 120 (2002).
- [24] V.A. Gaisin, B.V. Novikov, V.G. Talalaev, A.S. Sokolov, I.V. Shtrom, V.A. Chugunov, G.E. Cirlin, Y.B. Samsonenko, A.A. Tonkikh. *Proc. 13th Int. Symp. „Nanostructures: Physics and Technology“* (St.Petersburg, Russia, 2005) p. 352.
- [25] V.G. Talalaev, B.V. Novikov, G. Gobsch, R. Goldhahn, N. Stein, J.W. Tomm, A. Maassdorf, G.E. Cirlin, V.N. Petrov, V.M. Ustinov. Phys. Status Solidi B, **224**, 101 (2001).
- [26] V.G. Talalaev, J.W. Tomm, N.D. Zakharov, P. Werner, B.V. Novikov, A.A. Tonkikh. Appl. Phys. Lett., **85**, 284 (2004).
- [27] J. Phillips, P. Bhattacharya, U. Venkateswaran. Appl. Phys. Lett., **74**, 1549 (1999).
- [28] S.I. Rybchenko, I.E. Itskevich, M.S. Skolnick, J. Cahill, A.I. Tartakovskii, G. Hill, M. Hopkinson. Appl. Phys. Lett., **87**, 033 104 (2005).

Редактор Л.В. Шаронова

Baric properties of InAs quantum dots

B.V. Novikov⁺, G.G. Zegrya*, R.M. Peleshchak[†],
O.O. Dan'kiv[†], V.A. Gaisin⁺, V.G. Talalaev^{+•},
I.V. Shtrom⁺, G.E. Cirlin*[°]

⁺ V.A. Fok Institute of Physics,
Saint-Petersburg State University,
198504 St. Petersburg, Russia

* Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

[†] I. Franko State Pedagogic University,
82100 Drogobych, Ukraine

[•] Max-Planck Institute of Microstructure Physics,
06120 Halle, Germany

[×] Saint-Petersburg Physico-Technical Science
and Education Center,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

[°] Institute for Analytical Instrumentation,
Russian Academy of Sciences,
190103 St. Petersburg, Russia

Abstract Baric dependencies of the energy structure for InAs quantum dots (QDs) in the GaAs matrix are calculated on the basis of the deformation potential model. The assumed absence of interaction between QDs having the spherical shape and the same sizes enabled to identify the dependence between baric coefficient and radiative transition energy in a quantum dot. Similar dependence has also been experimentally determined in photoluminescence spectra of InAs/GaAs structures under hydrostatic pressure. The paper discusses the qualitative agreement of the theory and the experiment, and possible reasons of the quantitative differences. The conclusion is made about the contribution of such factors, as size dispersion, Coulomb interaction between carriers and tunnel interaction between QDs, into this discrepancy.