

**Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Институт физики, нанотехнологий и телекоммуникаций**

На правах рукописи

Косарев Александр Николаевич

Экситонные эффекты в системах квантовых ям и квантовых точек

Направление подготовки 03.06.01 Физика и астрономия

Код и наименование

Направленность 03.06.01_05 Физика конденсированного состояния

Код и наименование

НАУЧНЫЙ ДОКЛАД

об основных результатах научно-квалификационной работы (диссертации)

Научный руководитель:
профессор, д. ф.-м. н.,
Чалдышев Владимир Викторович

Санкт-Петербург – 2021

Научно-квалификационная работа выполнена на кафедре физики физико-механического института

Директор ВШ/Зав.каф. :

Апушкинский Евгений Геннадьевич,
доктор физико-математических наук,
профессор

Научный руководитель:

Чалдышев Владимир Викторович,
доктор физико-математических наук,
профессор

Рецензент:

Колесникова Анна Львовна.
доктор физико-математических наук,
Ведущий научный сотрудник
Института проблем машиноведения
Российской академии наук

С научным докладом можно ознакомиться в библиотеке ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» и на сайте Электронной библиотеки СПбПУ по адресу: <http://elib.spbstu.ru>

Общая характеристика работы

Актуальность работы

Полупроводниковые квантовые точки (КТ) являются важным объектом современной оптоэлектроники. Из-за способности локализовать носители заряда во всех трёх направлениях КТ можно рассматривать как искусственные атомы^{1,2}. Современные технологии роста полупроводников позволяют варьировать форму и состав КТ в широком диапазоне, что позволяет получать структуры с локализуемыми потенциалами различной формы. КТ могут быть использованы в качестве активных сред для различных электронных, оптических и оптоэлектронных устройств, к примеру лазеров, солнечных элементов или одноэлектронных запоминающих устройств.

Наиболее перспективными считаются квантовые точки, полученные методом молекулярно-лучевой или газофазной эпитаксии путем преобразования двухоснодеформированного эпитаксиального слоя в систему трехмерных островков, что обусловлено термодинамически благоприятным высвобождением упругой энергии. Последующее зарастивание материалом барьера делает такие КТ хорошо совместимыми с любыми устройствами, выращиваемыми методом эпитаксиального роста на основе GaAs-совместимых материалов.

Одной из наиболее популярных систем КТ являются КТ InAs в матрице GaAs, выращиваемые по методу Странского-Крастанова. Такие КТ в зависимости от формы и состава потенциально могут формировать эффективные излучатели в спектральном диапазоне 0.4 – 1.5 эВ, границы которого определяются ширинами запрещенной зоны InAs и GaAs, соответственно. В действительности, за счёт того, что КТ выращивается без нарушения когерентности гетероструктуры, а постоянные решётки чистых InAs и GaAs рассогласованы на ~7%, КТ InAs оказывается неизбежно упруго деформирована, вследствие чего ширина запрещенной зоны в ней увеличивается примерно вдвое. С учетом энергии размерного квантования, глубина локализации носителей заряда в КТ оказывается весьма небольшой. Тем самым

проблема глубокой локализации носителей заряда является одной из наиболее актуальных как для КТ InAs так и для других КТ, получаемых путем самоорганизации методом Странского-Крастанова.

Цель и задачи исследования

Целью работы было изучение возможностей и механизмов увеличения глубины локализации носителей заряда в квантовых точках.

В ходе исследования решались следующие **задачи**:

- Построение упругой модели квантовой точки. Расчет всех компонент тензоров напряжений и упругих деформаций, с учетом размеров и формы КТ, а также пространственного распределения In.
- Построение квантово-механической модели квантовой точки. Определение квантующих потенциалов для электронов, тяжелых и лёгких дырок на основе результатов расчета полей механических напряжений и деформаций. Решение задачи квантовой механики методом конечных элементов в полученных потенциалах для электронов и дырок.
- Верификация модели путем сравнения результатов расчета с экспериментом и с результатами расчетов, выполненных другими вторами.
- Исследование влияния соотношения сторон пирамидальной InAs КТ на распределение компонент тензора упругой деформации и на глубины локализации электронов и тяжелых дырок.
- Исследование возможностей и механизмов влияния зарацивания КТ InAs квантовой ямой InGaAs (система квантовая точка в квантовой яме -- DWELL англ. dot in well) на глубины локализации электронов и тяжелых дырок. Сравнение результатов расчета с экспериментом. Определение оптимальной конфигурации DWELL для системы КТ InAs - квантовая яма InGaAs, обеспечивающей наиболее глубокую

локализацию носителей заряда при сохранении когерентности гетерограниц.

Научная новизна

Задачи о моделирование упругих полей напряжений и деформаций в квантовых точках, как и квантово-механическая задача о локализации носителей в них была ранее решена для разных конфигураций КТ. Особенностью нашего подхода является систематический совместный анализ результатов квантово-механических расчетов и расчетов упругих полей. В результате:

Впервые выявлена возможность увеличения глубины локализации носителей заряда в самоорганизованных КТ путем изменения их формы без изменения объема. Для пирамидальных КТ InAs оптимальное отношение высоты к основанию пирамиды оказалось примерно равным 0.2.

Впервые определены механизмы, обеспечивающие изменения локализации носителей заряда при формировании КТ InAs в квантовой яме InGaAs (DWELL). Определена конфигурация DWELL, при которых достигается максимальная глубина локализации носителей заряда при сохранении когерентности гетероинтерфейсов в системе.

Теоретическая и практическая значимость работы

С учётом широкого круга применений полупроводниковых наноструктур в современном мире задача глубокой локализации носителей заряда в квантовых точках имеет большую практическую значимость. Наши результаты показали, что глубину локализации можно изменить путем целенаправленного изменения формы КТ, при их самоорганизации и последующем заращивании.

В частности, важной практической задачей является смещение спектрального положения оптического перехода в КТ InAs в область длин волн 1.3 мкм. При помощи разработанной нами модели были проанализированы структур DWELL на

основе КТ InAs и квантовых ям InGaAs. Было показано, что в экспериментальных работах по увеличению глубины локализации носителей посредством заращивания КТ квантовой ямой, авторы приблизились к максимально возможному увеличению глубины локализации носителей заряда 160 мэВ. Мы предложили оптимальную конфигурацию таких DWELL, обеспечивающую наиболее глубокую локализацию носителей заряда с сохранением когерентности гетероинтерфейсов.

Несмотря на то, что расчет был выполнен для системы InAs - GaAs, результаты являются качественно-универсальными и при изменении материальных параметров применимы для таких систем как III-V, III-N, II-VI и Si-Ge.

Теоретическая значимость работы состоит в рассмотрении формы КТ с точки зрения распределения её упругой энергии между гидростатическим, девиаторным и сдвиговым компонентами тензора деформации. Новым и значимым является представление о влиянии формы КТ не только посредством вклада размерного квантования, но и перераспределения упругой деформации между вышеупомянутыми компонентами, что приводит к снятию вырождения и изменению электронной конфигурации.

Апробация работы и публикации

По материалам работы были сделаны следующие доклады:

1. A. N. Kosarev, V. V. Chaldyshev, Impact of In distribution on the electronic structure of InGaAs quantum dots. 11th International Conference on Quantum Dots, December 7-11, 2020, Munich, Germany, poster

2. А. Н. Косарев, В. В. Чалдышев, Можем ли мы изменить локализацию носителей в самоорганизованных квантовых точках? XXV Симпозиум «Нанофизика и наноэлектроника». 9 - 12 марта 2021 года, Нижний Новгород, Россия, стендовый доклад

3. А. Н. Косарев, В. В. Чалдышев, Локализация носителей в само-организованных квантовых точках InAs, Низкоразмерный семинар, ФТИ им. А.Ф.Иоффе, Санкт-Петербург, Россия, 12 апреля 2021 года, устный доклад

По материалам работ были сделаны следующие публикации:

Kosarev Alexander, Chaldyshev Vladimir V.. Carrier localization in self-organized quantum dots: An interplay between quantum and solid mechanics. *Applied Physics Letters*, 2020, 117 (20), 202103

Косарев Александр Николаевич, Чалдышев Владимир Викторович. Можем ли мы изменить локализацию носителей в самоорганизованных квантовых точках?. Труды международного симпозиума “Нанопизика и нанозлектроника” 2021, т.2, с. 706-707

Косарев Александр Николаевич, Чалдышев Владимир Викторович. Impact of In distribution on the electronic structure of InGaAs quantum dots. Abstract of 11th International Conference on Quantum Dots, 2020

Косарев Александр Николаевич, Чалдышев Владимир Викторович. Carrier localization by a quantum dot in a quantum well. *Physical Review Applied*, 2021 (на рецензии в журнале)

А. Н. Косарев, В. В. Чалдышев. Локализация носителей заряда в самоорганизованных квантовых точках InAs. Письма в Журнал технической физики, 2021 (в печати)

Основные положения, выносимые на защиту

- Зависимость глубины локализации носителей заряда в самоорганизованных полупроводниковых квантовых точках, находящихся в объеме полупроводника, имеет минимум, положение которого определяется вкладом размерного квантования и распределением упругой энергии между гидростатической, девиаторной и сдвиговой компонентами деформаций. Для пирамидальных КТ InAs в GaAs такой минимум достигается при отношении высоты пирамиды к основанию, близком к 0.2.

- Увеличение глубины локализации носителей в квантовой точке InAs, самоорганизованной на подложке GaAs, при зарращивании квантовой ямой InGaAs происходит в результате одновременного действия трёх процессов: перераспределения упругих полей, увеличения объёма КТ и уменьшения соотношения её высоты и длины основания.

Введение

Последние тридцать лет полупроводниковые наноструктуры стали привлекать огромный интерес как фундаментальной, так и прикладной науки. Во-первых, они привлекательны с научной точки зрения, поскольку предоставляют средства для создания искусственных потенциалов для носителей, электронов и дырок в полупроводниках, где масштабы сравнимы с длиной волны де Бройля или меньше ее. Эффекты размерного квантования в наноструктурах играют важную роль и, что заслуживает особого внимания, могут быть спроектированы и выращены с достаточной точностью. Во-вторых, благодаря появлению полупроводниковых наноструктур квантовая механика становится нужна не только для академических целей, а становится необходимой для расчётов промышленных устройств. Размерное квантование делает возможными новые концепции устройств, которые получают дополнительные степени свободы, такие как спин или квантовая фаза. Таким образом, полупроводниковые наноструктуры имеют большой потенциал для применения в нано- и оптоэлектронике, квантовой оптике, спинтронике и многих других областях.

Самоорганизованные полупроводниковые квантовые точки (КТ) на протяжении трёх десятков лет активно притягивают внимание исследователей из-за их способности локализовать носители заряда во всех трех измерениях. Такие «искусственные атомы» могут быть включены во многие электронные, оптические и оптоэлектронные устройства, такие как лазеры, солнечные элементы или одноэлектронные запоминающие устройства

Пирамидальная квантовая точка в объемном барьере. Эффект формы.

В самоорганизованных КТ локализирующий потенциал носителей определяется геометрией, химическим составом и упругими деформациями, которые являются движущей силой их формирования. В этой главе работы мы показываем, как изменение соотношения сторон квантовой точки приводит к существенному перераспределению компонентов механического поля, что, в свою очередь, обеспечивает определенные нетривиальные условия для наиболее сильной локализации носителей заряда в любом заданном объеме квантовой точки.

Интерес к самоорганизованным КТ возник благодаря их способности трехмерной локализации носителей заряда, из-за чего они иногда называются «искусственными атомами». КТ могут быть использованы в качестве активных сред для различных электронных, оптических и оптоэлектронных устройств, к примеру лазеров, солнечных элементов или одноэлектронных запоминающих устройств.

Наиболее перспективными считаются квантовые точки, полученные молекулярно-лучевой или парофазной эпитаксией методом Странского-Крастанова³, что обусловлено термодинамической выгодой формирования островков на поверхности. Последующее заращивание материалом барьера делает такие КТ хорошо совместимыми с любыми устройствами, выращиваемыми методом эпитаксиального роста на основе GaAs-совместимых материалов, включая InAs-GaAs-InP-GaSb, Ge - Si⁴, InN - GaN - AlN⁵ и т. д.

Большую популярность заслужила система InAs/GaAs так как материал ямы имеет запрещенную зону 0.4 эВ при ширине барьера в 1.5 эВ, что потенциально охватывает широкий спектр оптического диапазона, включая полосу оптической связи на 1.55 мкм (0.8 эВ). В действительности, размерное квантование и изменение ширины запрещенной зоны под действием упругих деформаций увеличивают энергию носителей, локализованных в таких КТ. Вклад размерного квантования

может быть ослаблен увеличением размеров квантовой точки, но её размер не может превышать критического значения, которое определяется механическими напряжениями. В системе самоорганизованных КТ механические напряжения являются неотъемлемой частью процесса их формирования и принципиально не могут быть исключены, и таким образом мы приходим ко второму вкладу в увеличение ширины запрещённой зоны, о котором и пойдёт речь в этой работе.

В этой работе мы показываем, что изменением формы КТ ведёт к перераспределению компонент тензора деформаций и энергий квантования носителей нетривиальным образом и что глубина локализации носителей в зависимости от соотношения сторон КТ при постоянном размере обладает ярко выраженным минимумом. Это означает, что определенное соотношение сторон обеспечивает наиболее сильную локализацию электронов и дырок и, следовательно, максимально возможную длину волны оптического излучения.

В этой работе мы рассматриваем пирамидальные квантовые точки InAs, полученные с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках GaAs с ориентацией (001). Эта технология достаточно развита, чтобы рост наноструктур был хорошо повторяем и применим для серийного производства. Формирование КТ методом Странски-Крастанова достигалось осаждением 5 монослоев (МС) InAs со скоростью 0,05 МС / с при температуре 460 °С. Квантовые точки заращивались 30 нм GaAs со скоростью осаждения 0.3 нм / с при неизменной температуре. Процедура роста описывалась в работе⁶. При помощи просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения были определены размеры типичной пирамидальной квантовой точки InGaAs, которая имеет высоту $H = 9 \pm 0,5$ нм и ширину основания $L = 28 \pm 0.5$ нм⁷. Поверхности пирамиды определены следующими кристаллографическими направлениями: края основания параллельны направлениям [100] и [010], образуя квадраты в плоскости. После заращивания КТ InGaAs ограничена плоскостями {203} с ребрами $\langle 332 \rangle$. Эти параметры использовались в качестве референтного размера и соотношения сторон КТ. Отметим, что заращивание привело к определенному изменению соотношения

сторон пирамиды и изменения концентрации In-Ga внутри КТ. Такие изменения формы и состава типичны для самоорганизованных КТ. В этой работе мы использовали концентрацию индия как единственный свободный параметр модели и приняли его равным $C_{\text{In}} = 91\%$ для соответствия линии оптического перехода наблюдаемого экспериментально и предсказанного нашей моделью⁸.

В первую очередь мы рассчитывали упругие поля для референтных квантовых точек, а затем варьировали соотношение сторон в диапазоне $0.05 < H / L < 1.75$. Задача решалась с помощью метода конечных элементов. Размер ячейки составлял $100 \times 100 \times 110$ нм, в его центре находились с КТ InGaAs и смачивающий слой, окруженные континуумом GaAs. Основание пирамиды находилось на глубине 60 нм относительно поверхности образца. Геометрия и состав смачивающего слоя были взяты из просвечивающей электронной микроскопии для референтного образца¹⁶. Использовались граничные условия свободной поверхности наверху ячейки и нулевое смещение внизу. Все параметры материалов для раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ рассчитывались по правилу Вегарда⁷.

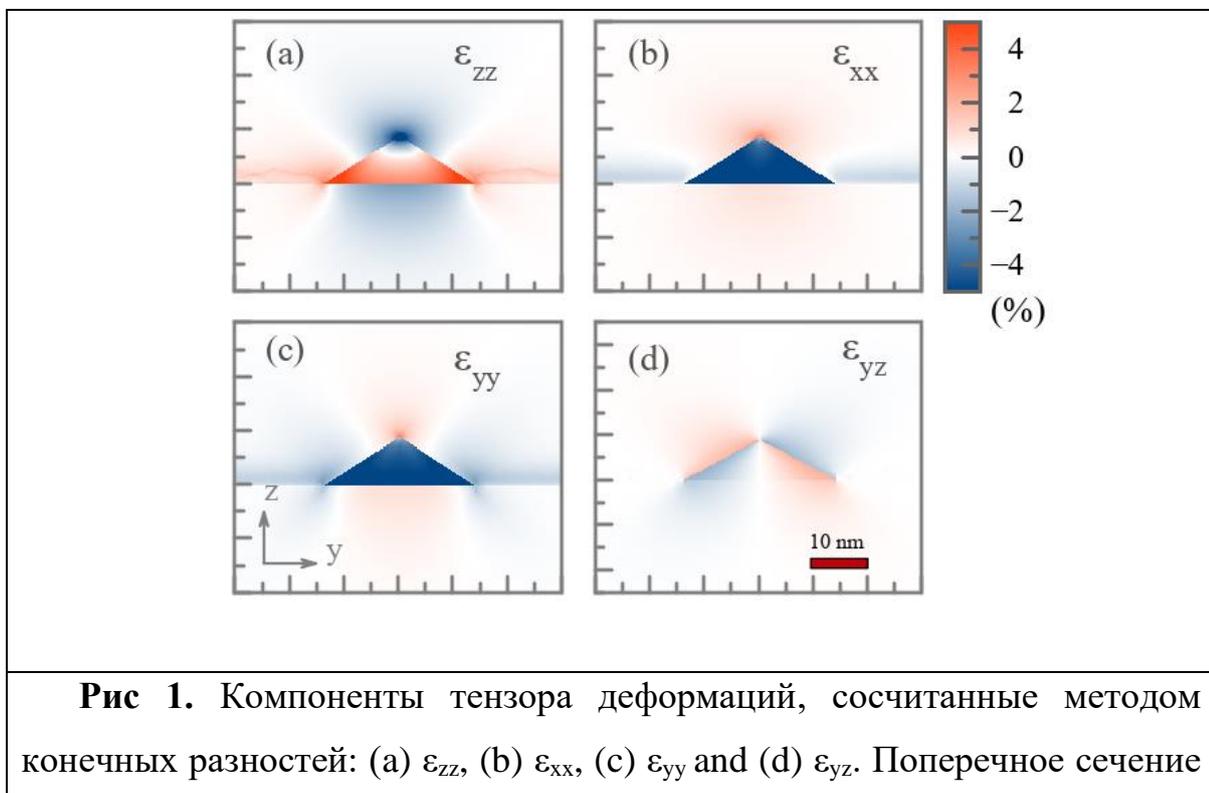


Рис 1. Компоненты тензора деформаций, сосчитанные методом конечных разностей: (a) ϵ_{zz} , (b) ϵ_{xx} , (c) ϵ_{yy} and (d) ϵ_{yz} . Поперечное сечение

квантовой точки плоскостью ZY, проходящей через ось симметрии пирамиды.

Для иллюстрации структуры тензора упругих деформаций в референтной КТ его компоненты представлены на Рис. 1, где показаны распределения компонент в плоскости ZY, проходящей через ось симметрии пирамиды. Сжатие в плоскости (как компоненты ε_{xx} , так и ε_{yy}) очевидно для всего объема КТ. Внеплоскостная составляющая ε_{zz} положительна в объеме КТ, но отрицательна вблизи краев. Сдвиговая составляющая ε_{yz} практически не равна нулю на гранях InGaAs-GaAs {203} и в их непосредственной близости. Все компоненты тензора упругих деформаций быстро убывают в окружающем барьере GaAs.

Показанные распределения остаются качественно неизменными при различных соотношениях сторон квантовых точек, однако величины компонент меняются. Для рассмотрения этого эффекта удобно рассматривать не тензорные поля, а свести их к небольшому набору понятных и легко интерпретируемых скалярных значений. Для этого мы разделим энергию на компоненты, ассоциированные с различными компонентами поля напряженно-деформированного состояния и интегрируем плотности каждого вида энергии по объёму КТ либо по всему объёму ячейки. Полная упругая энергия может быть представлена с помощью тензора напряжений σ и тензора упругих деформаций ε следующим образом.

$$W_{total} = \int \left[\frac{1}{6} \text{tr}(\varepsilon) \cdot \text{tr}(\sigma) + \left(\frac{1}{2} \varepsilon_{ii} \cdot \sigma_{ii} - \frac{1}{6} \text{tr}(\varepsilon) \cdot \text{tr}(\sigma) \right) + \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \cdot \sigma_{ij} \right] dV$$

(1)

Здесь мы разделяем компоненты на гидростатическую, девиаторную и сдвиговую. Первая, как следует из названия, соответствует гидростатическому сжатию. Под девиаторной компонентой мы подразумеваем в общем случае изменение формы объекта при сохраняющемся объеме, что в нашем конкретном случае соответствует двусосному сжатию. Сдвиговая компонента определяется

недиагональными компонентами тензора деформации и интересует нас в меньшей степени, так как в основном она присутствует на поверхности КТ, где значения волновых функций носителей, локализованных внутри, уже малы.

На рис. 2а видно, что полная упругая энергия уменьшается при меньшем удлинении. Это должно привести к появлению термодинамической движущей силы, которая вызовет уменьшение аспектного отношения поверхностных квантовых точек в процессе зарастания. Это явление экспериментально наблюдалось для InAs, Ge и других самоорганизованных КТ^{7,9,10,11}. Интересно отметить, что гидростатическая часть упругой энергии в основном накапливается внутри КТ, тогда как упругая энергия в окружающем барьере из GaAs в основном создается девиаторными и сдвиговыми механическими полями. Этот результат хорошо согласуется с предсказаниями упрощенных аналитических моделей включений.

^{12, 13, 14, 15}

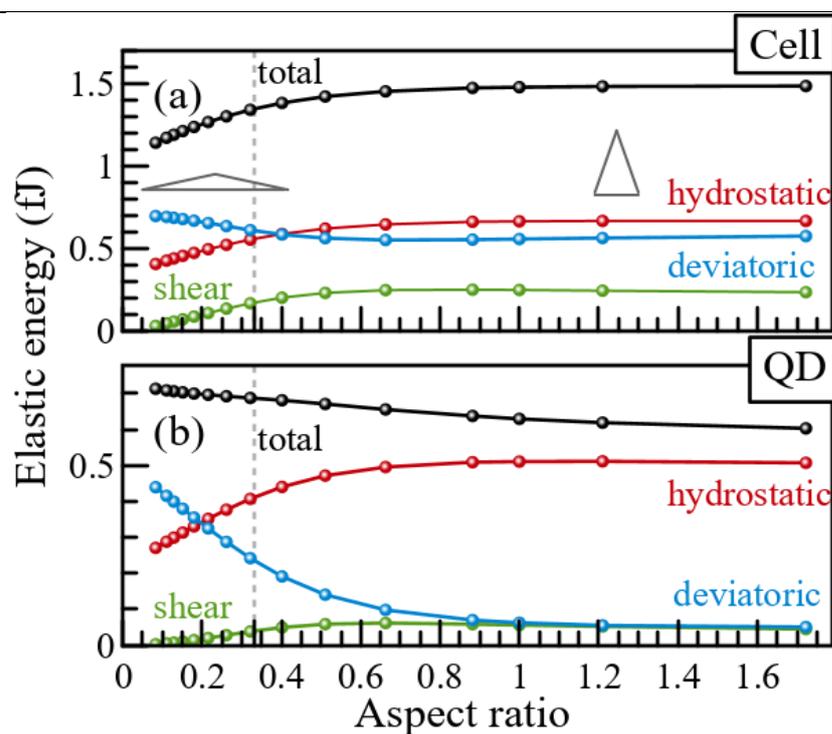


Рис. 2. Упругая энергия системы в зависимости от соотношения сторон КТ. Черная кривая - полная энергия, красная кривая - гидростатическая составляющая, синяя кривая - девиаторная составляющая, зеленая кривая - сдвиговая

составляющая. Интегрирование проводится по всей ячейке (а) и только по объему КТ (б). Серая пунктирная вертикальная линия отмечает соотношение сторон $H / L = 0,32$, что соответствует форме референтной КТ.

В отличие от полной упругой энергии, интегрированной по всей ячейке, ее часть, накопленная внутри КТ, постепенно увеличивается при уменьшении соотношения сторон. Особый интерес вызывает тот факт, что это увеличение обеспечивается девиаторной компонентой упругой энергии. Это объясняется тем, что при малом удлинении механическое поле КТ приближается к двухосному механическому полю тонкой плёнки с почти нулевой составляющей сдвига.

На основе полученных распределений упругих деформаций мы решили задачу квантовой механики для электронов и дырок. В этой работе мы не будем обсуждать структуру полученных волновых функций и сосредоточимся исключительно на собственных значениях энергии для основного состояния электронов и тяжелых дырок. Влияние механического поля на энергии электронов и дырок реализуется через деформационные потенциалы и пьезоэффект. Сдвиг электронного потенциала относительно недеформированного материала пропорционален относительному изменению объема элементарной ячейки кристаллической решетки.

$$\delta E_e = a_e tr(\varepsilon) \tag{2}$$

Здесь a_e - отрицательный потенциал гидростатической деформации электрона. Валентная зона недеформированного InGaAs вырождается в центре зоны Бриллюэна, где и находится самое маленькое значение запрещенной зоны. Вырождение энергий тяжелой и лёгкой дырки снимается за счёт девиаторной и сдвиговой деформации, которые приводят к расщеплению зон тяжелых и лёгких дырок¹⁶.

$$\delta E_h = a_h \cdot tr(\varepsilon)$$

$$\pm \sqrt{\frac{b^2}{2} [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})^2 + (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz})^2] + d^2(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2)} \quad (3)$$

Здесь a_h - потенциал гидростатической деформации дырок. Обратите внимание, что a_h положительно и $|a_h / a_e| \approx 0.17$. b и d - деформационные потенциалы девиаторной и сдвиговой составляющих тензора деформации соответственно. Для низкого удлинения компоненты деформации сдвига вне диагонали намного меньше, чем девиаторные диагональные, и уравнение (3) можно свести к

$$\delta E_h \approx a_h \cdot \text{tr}(\varepsilon) \pm b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz}), \quad (4)$$

где симметрия в плоскости тензора деформации была учтена.

Несмотря на то, что InGaAs является пьезоэлектриком – этот эффект в данной работе не рассматривался. Пьезоэлектрические поля рассматриваемой квантовой точки приводят в первую очередь к изменению формы волновой функции и лишь незначительно меняют энергии локализации носителей.

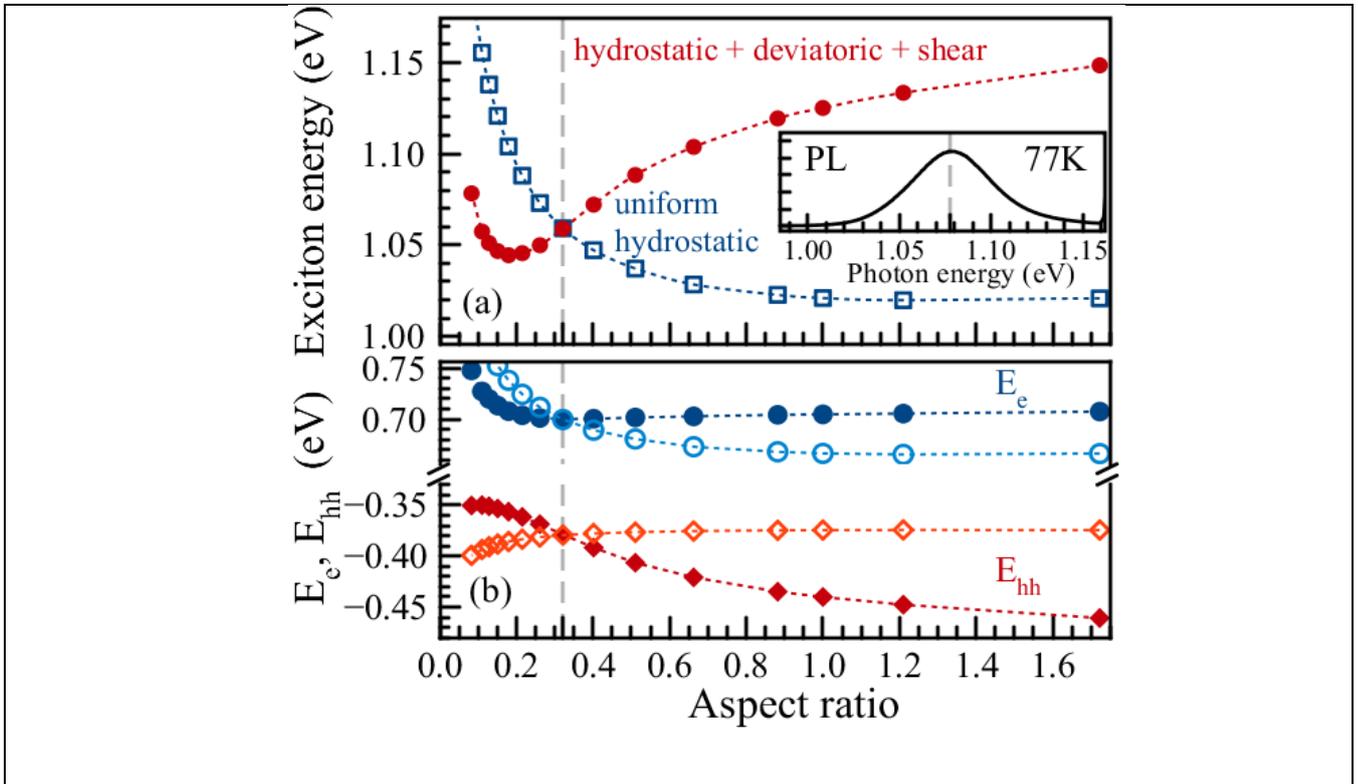


Рис. 3. (а) Энергия экситона как функция соотношения сторон КТ (красная кривая с закрашенными кружками). Синяя кривая с пустыми квадратами рассчитана для однородного гидростатического сжатия. Вертикальная пунктирная серая линия показывает геометрию 0.32, соответствующую референтной КТ. На вставке показан экспериментально измеренный спектр фотолюминесценции исследуемого образца с квантовыми точками InAs. (б) Энергии основных состояний электронов (закрашенные синие кружки) и тяжелых дырок (закрашенные красные ромбы) в КТ с разным соотношением сторон. Открытые символы соответствуют модели с однородным гидростатическим сжатием.

Задача на поиск собственных значений в квантовой механике решалась методом конечных элементов на той же конечно-разностной сетке, что и для расчёта упругих полей. В расчетах мы использовали проверенный набор параметров материалов из работы¹⁷, где квантово-механические расчеты проводились для пирамидальных квантовых точек InAs с гранями {101}. Вычисленные собственные значения энергии электронов и тяжелых дырок в зависимости от соотношения сторон показаны на рисунке 3(б) заштрихованными синими кружками и красными ромбами соответственно. Вертикальная серая пунктирная линия обозначает соотношение сторон референтной КТ.

Основное состояние электрона имеет хорошо выраженный минимум энергии при соотношении сторон 0.2. Он быстро увеличивается при меньшем соотношении сторон из-за сильного вклада размерного квантования, проявляющегося по причине уменьшения линейных размеров КТ в направлении роста. Относительно медленное увеличение для больших значений соотношения сторон происходит из-за увеличения вклада гидростатического сжатия, которое хорошо заметно на рисунке 2(б). Влияние размерного квантования на основное состояние тяжелых дырок намного слабее, чем на состояния электронов. Это происходит из-за значительно большей эффективной массы тяжелой дырки, чем у электрона. Энергия основного

состояния тяжелых дырок увеличивается с уменьшением соотношения сторон в результате преобразования гидростатического сжатия в девиаторную деформацию, как показано на рисунке 2(b). Положительный сдвиг δE_h возникает из-за второго девиаторного члена в уравнении (4), который имеет значительно большие значения, чем гидростатическая компонента. В данном случае положительный сдвиг означает более сильную локализацию дырок в КТ.

Красная кривая на рисунке 3(a) показывает энергию излучательного перехода между электроном и тяжелой дыркой, локализованных в квантовой точке фиксированного объема в зависимости от соотношения сторон. Здесь мы полагаем энергию связи экситона равной 20 мэВ и не зависящей от геометрии. Ярко выраженный минимум вблизи $H/L = 0.2$ соответствует максимально сильной локализации как электрона, так и тяжелых дырок. Дополнительная энергия локализации, которую можно получить при изменении соотношения сторон КТ превышает 0.1 эВ.

Серая вертикальная пунктирная линия на рисунке 3 отмечает соотношение сторон 0.32 для референтной квантовой точки, экспериментально исследованной в работе 7. На вставке показан экспериментальный спектр фотолюминесценции, измеренный при 77 К. Хотя экспериментальный спектр довольно широк, из-за определенного распределения по размерам в ансамбле квантовых точек, пиковая энергия фотонов хорошо соответствует расчетному значению. Таким образом, используемая модель верифицирована экспериментом, геометрия – при помощи просвечивающей электронной микроскопии, а спектральное положение излучательного перехода – при помощи измерения спектров фотолюминесценции из образца.

Для лучшего понимания обнаруженного явления мы провели дополнительные модельные расчеты для виртуальных КТ с однородным гидростатическим полем деформаций, где девиаторная и сдвиговые компоненты отсутствуют. Величина деформации была скорректирована для получения такой же энергии экситона, что и

для референтной КТ. Рассчитанные энергии основных состояний электрона и дырки показаны на рисунке 3(b) кружками и ромбами без заливки. В такой модели ни электроны, ни дырки не имеют какой-либо предпочтительной формы, связанной с формой КТ. Сравнение результатов двух модельных расчетов показывает, что подходящее соотношение сторон пирамидальных квантовых точек InGaAs может обеспечить дополнительную энергию локализации носителей за счет инженерии поля деформации. По сравнению с однородным гидростатическим сжатием, которое может быть реализовано в сферическом нановключении, пирамидальная КТ того же объема с соотношением сторон 0.18 обеспечивает более глубокую локализацию более чем на 0.1 эВ.

Если рассматривать типичную пирамидальную квантовую точку InGaAs с гранями $\{101\}$, преобразованную в пирамиду того же объема и состава, но с соотношением сторон 0.18, то это преобразование обеспечивает 45 мэВ дополнительной энергии локализации носителей заряда. КТ с гранями $\{101\}$, трансформируемыми в форму референтной КТ, должна улучшить локализацию носителей на 30 мэВ. Преобразование референтной КТ до аспектного отношения 0.18 должно дополнительно получить локализацию на 15 мэВ.

Любой ансамбль самоорганизованных КТ демонстрирует неоднородность распределение размеров КТ, которое неизбежно при таком механизме роста. Для такого ансамбля важно оценить чувствительность взаимодействия между квантовой механикой и механикой твердого тела к размерам квантовых точек. Для этого были проведены расчёты аналогичные предыдущим для КТ с большим (до 3000 нм³) и меньшим объемом (до 1500 нм³) относительно референтной КТ (2352 нм³). Разница в энергиях экситонов для наибольшего и наименьшего объемов квантовых точек приблизительно соответствует ширине экспериментального спектра фотолюминесценции, показанного на рисунке 3. Для всех рассмотренных случаев зависимость от соотношения сторон аналогична показанной на рисунке 3(a) и минимум энергии излучения наблюдается, когда соотношение сторон находится в

диапазоне 0.17 -- 0.2. Это означает, что соответствующая технологическая настройка процесса самоорганизации затронет весь ансамбль квантовых точек.

Самоорганизованные КТ на свободной поверхности могут иметь довольно большое значение соотношения сторон, достигающее 0.5 для квантовых точек InAs с гранями $\{101\}$. Изменение полной упругой энергии в процессе зарастания создает термодинамическую силу для сплющивания поверхностных квантовых точек. Тогда правильная инженерия внутренней деформации и достижение желаемой локализации носителей становится вопросом эпитаксиальной технологии.

Таким образом, для рассмотренных выше обычных пирамидальных квантовых точек InGaAs наши расчеты предсказывают наименьшую энергию оптического излучения, когда отношение высоты к основанию составляет около 0.2. По сравнению с квантовыми точками с большим значением соотношения сторон они имеют значительное преимущество в глубине локализации носителей. Это явление проявляется вследствие взаимодействия механики твердого тела и квантовой механики локализованных электронов и дырок. Обнаруженное явление применимо к квантовым точкам в традиционных III-V, III-N, II-VI, Si-Ge и других системах материалов. Возникновение и проявление соответствующей зависимости формы будет зависеть от симметрии решетки и параметров материала, особенно от факторов анизотропии упругости атомной решетки и электронной структуры зоны Бриллюэна.

Квантовая точка в квантовой яме.

Как уже говорилось выше, глубина локализации носителей существенно ограничена полем механических напряжений и деформаций, возникающих из-за рассогласования решеток, которые необходимы для процесса самоорганизации. Кроме того, он устанавливает верхний предел объема квантовых точек с бездислокационными (когерентными) интерфейсами. В случае квантовых точек InAs в GaAs такое ограничение устанавливает максимальную длину волны излучения около 1.1 мкм. Глубокая локализация носителей является критически важной для большинства приложений, чтобы предотвратить термическое испарение локализованных носителей из квантовых точек на барьеры. В пределах когерентности интерфейса локализацию носителей в КТ заданного объема можно несколько улучшить за счет оптимизации формы и соотношения сторон.

Локализация носителей может быть усилена за счет значительного красного смещения оптического излучения, если КТ заращена квантовой ямой (КЯ). Такая структура будет называться DWELL (от англ. dot in well). Впервые было экспериментально показано Устиновым¹⁸ и Ниши¹⁹, что оптическое излучение квантовых точек InAs может быть сдвинуто в красную область до 1.3 мкм, если квантовая точка встроена в квантовую яму InGaAs.

За этими первоначальными наблюдениями последовало большое количество статей, см., например, ^{20, 21, 22}, в которых структура DWELL исследовалось экспериментально и с помощью моделирования. Было показано, что красное смещение экситонного оптического излучения InAs зависит от геометрии квантовой точки, а также толщины и химического состава квантовой ямы. Интересно отметить, что экспериментальная оптимизация параметров DWELL привела к аналогичным результатам многочисленными независимыми исследовательскими группами. А именно, наибольшие экспериментально достигнутые красные смещения для оптического излучения из InAs DWELL по сравнению с InAs QD в объемном GaAs составляют 160 мэВ¹⁸, 140 мэВ¹⁹, 160 мэВ²⁰.

Наблюдаемое красное смещение спектров интерпретировалось двумя различными способами. В работе Устинова¹⁸ в результате выращивания квантовой ямой InGaAs наблюдалось увеличение основания пирамидальных квантовых точек InAs. Таким образом, более глубокая локализация была объяснена более слабым вкладом размерного квантования в увеличенном объеме локализации. В свою очередь в работе Ниши и др.¹⁹ предложили совершенно другую причину, объяснив эффект уменьшением деформации рассогласования. Квантовая яма InGaAs тетрагонально искажается при выращивании на толстой подложке GaAs, следовательно, деформация КТ в деформированной КЯ более слабая, относительно деформации КТ в матрице GaAs.

В этой части работы мы показываем, что DWELL обеспечивает более глубокую локализацию носителей заряда за счет комплексного действия трёх процессов, а именно: увеличения объема КТ, изменения соотношения сторон КТ и перераспределения деформации, обеспечиваемого КЯ. Мы разложили общую возможную энергетическую выгоду на эти три вклада и исследовали оптимальную конфигурацию DWELL, размер которой не нарушал когерентности всей плёнки.

Мы рассматриваем проблему DWELL в рамках комплексной модели, показанной в предыдущей главе, которая учитывает взаимодействие между механикой твердого тела встроенных упругих полей и размерного квантования локализованных электронов и дырок. В этом разделе мы сосредоточимся на InAs QDs в GaAs, поскольку эта система практически важна и имеется большое количество надежных экспериментальных данных для проверки результатов наших расчетов. В действительности, аналогичные результаты могут быть получены и для других материальных систем как III-V, III-N, II-VI и Si-Ge.

Используемая здесь модельная геометрия аналогична описанной в предыдущем разделе. Мы рассматриваем пирамидальный InAs QD с высотой H в направлении роста [001]. QD либо помещён в объем GaAs (QDB), либо встроен в InGaAs квантовую яму толщиной h (DWELL), как показано на рисунке 4. (a) и (b).

Основание QD в обоих случаях расположено на 60 нм ниже поверхности ячейки, которая свободна от напряжений. Края основания выровнены вдоль [100] и [010] кристаллографических направлений^{7,23}. Размер всей ячейки достигает 100~нм в направлениях x и y и 120 нм в направлении z . В моделировании варьировались такие параметры, как длина базы QD L , соотношение сторон КТ H/L , толщина InGaAs квантовой ямы h и концентрация индия в ней C_{In} .

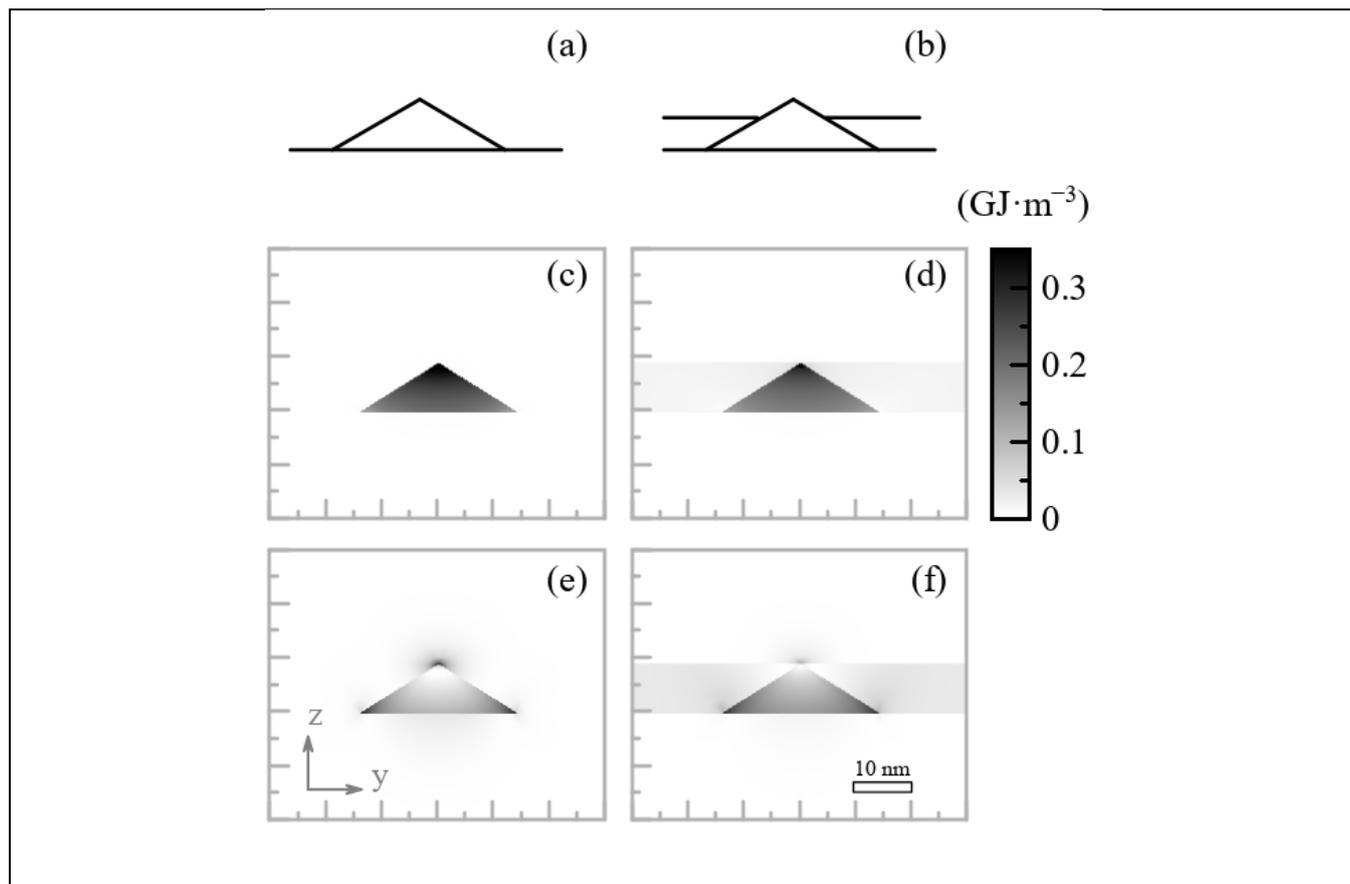


Рис. 4. Сравнение (a, c, e) КТ InAs в объемном GaAs и (b, d, f) InAs DWELL: (a, b) эскиз систем; (c, d) плотность гидростатической энергии; (e, f) плотность девиаторной энергии. Они и оси параллельны кристаллографическим направлениям [010] и [001] соответственно.

Сначала, используя метод конечных элементов (МКЭ), мы решили задачу механики сплошной среды и получили поля деформаций ε и напряжений σ . Затем мы определили собственные значения стационарного уравнения Шрёдингера на той

же конечно-разностной сетке в однозонном приближении. Это упрощение было подтверждено сравнением с результатами расчетов по 8-полосной k - p -модели, рассмотренной в работе¹⁷.

Аналогично предыдущей части работы компоненты разделяются на гидростатическую, девиаторную и сдвиговую. На рисунке 4 показаны карты плотностей упругой энергии, связанные с гидростатической (с, d), девиаторной (е, f) деформациями для случаев QDB (с, е) и DWELL (d, f). Плоскость поперечного сечения -- (100) при $x = 0$. На графике показана только центральная часть ячейки. Для обоих случаев высота КТ $H = 9$ нм и ее основание $L = 28$ нм, что соответствует референтной КТ. В случае DWELL структуры толщина квантовой ямы InGaAs составляла $h = 3.85$ нм при концентрации индия $C_{In} = 0.3$ молярной доли. КЯ с такими параметрами использовались в работах^{18,19} для достижения наиболее глубокой локализации носителей в DWELL.

Деформация КЯ определяется в большей степени двуслойной деформацией, которая хорошо заметна на рисунке 4 (d) и (f). Эти плотности энергии, можно вычислить и аналитически для заданного C_{In} , который определяет собственную деформацию из-за несоответствия решеток между InGaAs и GaAs $\varepsilon_m = (a_{InGaAs} - a_{GaAs})/a_{InGaAs}$. Соответствующие коэффициенты упругости могут быть определены для InGaAs в линейных приближениях. Тогда для КЯ InGaAs, параллельной плоскости (001), мы имеем объемный модуль $K = (c_{11} + 2c_{12})/3$, двухосный модуль $M = c_{11} + c_{12} - 2c_{12}^2 / c_{11}$ и коэффициент Пуассона $\nu = c_{12} / (c_{11} + c_{12})$. Как аналитические, так и модельные расчеты дают плотность гидростатической энергии в рассматриваемой КЯ с $C_{In} = 0.3$, $w_{QW}^h = 0.015$ ГДж/м³ и девиаторной плотностью энергии $w_{QW}^d = 0.03$ ГДж/м³. Энергия сдвига для КЯ без КТ внутри равна 0.

Распределение упругой деформации и соответствующей энергии внутри КТ неоднородно. Качественно он аналогичен QDB и DWELL. Наибольшая плотность гидростатической энергии соответствует вершине КТ, где она достигает 0.45 ГДж/м³. Эта величина одинакова для QDB и DWELL в конфигурации,

рассмотренной на рисунке когда QW не покрывает вершину QD. Плотность гидростатической энергии постепенно уменьшается от вершины к основанию, где $w_{\text{QDB}}^h = 0.2$ ГДж/м³ и $w_{\text{DWELL}}^h = 0.18$ ГДж/м³. Интегрирование по объему пирамиды показывает, что гидростатическая энергия уменьшается в целом с 0.51 ~ фДж (QDB) до 0.45 ~ фДж (DWELL).

Плотности девиаторной энергии, представленные на рисунке 4 (e) и (f), в основном сосредоточены около основания пирамиды для обоих случаев. $w_{\text{QDB}}^d = 0.08$ ГДж/м³ в центре и $w_{\text{QDB}}^d = 0.23$ ГДж/м³ в углы. Девиаторная энергия быстро уменьшается до вершины пирамиды, где КТ имеет в основном гидростатическую деформацию, но вызывает пятно девиаторной деформации в окружающей матрице GaAs. Хотя QDB и DWELL показывают схожее распределение девиаторной энергии внутри QD, есть важные количественные различия: $w_{\text{DWELL}}^d = 0.1$ ГДж/м³ в центре основание пирамиды и $w_{\text{DWELL}}^d = 0.25$ ГДж/м³ в углу. Девиаторная энергия, проинтегрированная по объему КТ, отличается на 25%, составляя 0.24 фДж в КДБ и 0.32 ~ фДж в DWELL.

Плотности энергии сдвига, в основном сосредоточены вблизи краев КТ. Полная энергия сдвига, проинтегрированная по КТ, как в случае QDB, так и DWELL, оказалась мала по сравнению с гидростатической и девиаторной энергиями. Сдвиговая составляющая в основном присутствует в непосредственной близости от сторон КТ, в то время как вокруг дна она значительно слабее. Для QDB самая высокая плотность энергии составляет около 0.04 ГДж/м³. В случае DWELL распределение деформации сдвига аналогично, но его плотность энергии в 2.5 раза меньше.

Для рассмотренных выше геометрий численное решение стационарного уравнения Шрёдингера с определенными полями деформаций показывает более глубокую локализацию как электронов, так и дырок в DWELL, чем в QDB. Соответствующее красное смещение оптического экситонного излучения составляет 52 мэВ. Эта величина существенно меньше экспериментально

наблюдаемого значения 140–160 мэВ^{18,19}. Из этого следует, что мы должны учитывать изменения формы и объема квантовых точек в дополнение к модификации, вызванной квантовыми ямами в поле деформационного напряжения, чтобы количественно описать эффект DWELL.

Прежде чем рассматривать эти дополнительные эффекты, проанализируем, какие параметры КЯ, т.е. h и C_{In} , обеспечивают наиболее глубокую локализацию носителей в данной КТ. Не удивительно, что большие концентрации C_{In} могут обеспечить более сильное изменение деформационных напряжений в КТ. Более толстая КЯ может закрыть собой большую часть КТ, модифицировав деформации в большем объеме.

Увеличение толщины квантовой ямы h и концентрации индия C_{In} приводит к увеличению упругой энергии за счет либо большего рассогласования решеток, либо большего напряженного объема. Преодолев определенный порог, упругая энергия вызывает образование дислокаций несоответствия, а его положение может быть оценено по формуле Мэттьюса-Блексли²⁴

$$\frac{b_x^2 + b_y^2 + (1-\nu)b_z^2}{8\pi(1+\nu)b_x h_{cr}} \ln \frac{\alpha h_{cr}}{b} = \epsilon_m \quad (4)$$

где b_x , b_y , b_z - компоненты вектора Бюргерса, b / α - радиус обрезания ядра дислокации. В расчетах мы рассматриваем дислокации с вектором Бюргерса $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$, наклоненным на 60° к линии дислокации и на 45° к (001). Такие дислокации ответственны за релаксационный процесс в пленках GaAs или InGaAs^{24,11}. На рисунке 5 (а) область под кривой показывает сочетания h и C_{In} , где бездислокационная квантовая яма InGaAs термодинамически устойчива на подложке GaAs с ориентацией (001). Параметры, использовавшиеся в работах 18 и 19 и в наших расчетах, описанных выше, для демонстрации концепции, отмечены серыми штриховыми линиями.

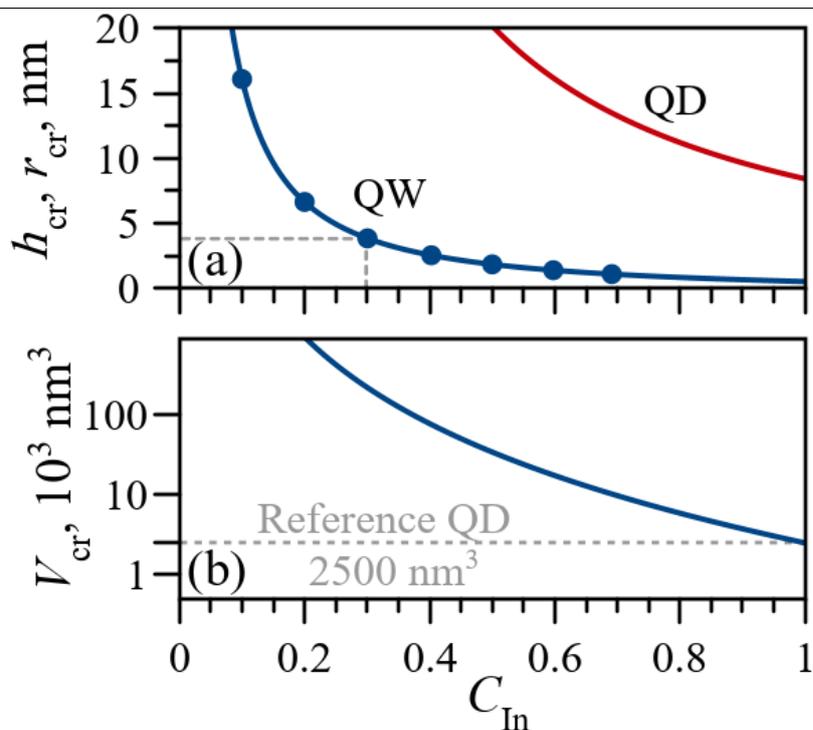


Рис. 5. (а) зависимость критической высоты h_{cr} квантовой ямы и радиуса r_{cr} сферического нановключения от концентрации In ; (б) критический объем КТ $InGaAs$ как функция концентрации In .

На рисунке 6 показаны результаты квантово-механических расчетов энергий основного состояния электрона, дырки и экситона, локализованных в DWELL, со следующими параметрами. Высота квантовых точек $InAs$ составляет 9 нм, их основание - 18 (красные кружки), 28 (зеленые ромбы) или 38 нм (синие треугольники). Концентрация индия в КЯ изменяется по горизонтальной оси от 0 (случай QDB) до 0.7. Толщина h квантовой ямы для каждого C_{In} берется равной критическому значению, задаваемому формулой Мэттьюса-Блексли. Для большей наглядности мы также сделаем расчет для квантовой точки $InAs$ с основанием 28 нм и высотой 9 нм, которая полностью покрыта квантовой ямой без потери когерентности гетероинтерфейса. Результаты этих расчетов показаны светло-зелёными, соединёнными пунктирными линиями.

Из рисунка 6 следует, что локализация как электронов, так и дырок в КТ усиливается с ростом C_{In} в КЯ из-за усиления модификации поля напряженно-деформированного состояния. Однако требование когерентности интерфейса не позволяет использовать высоту КЯ равной высоте КТ. При больших концентрациях C_{In} толщина ямы становится значительно меньшей, чем высота КТ и модифицирует меньшую часть объема последней, а вершина находится в основном за пределами слоя квантовой ямы. В качестве компромисса между силой эффекта и затронутым объемом оптимальные параметры квантовой ямы составляют $C_{In} = 0.3$, $h = 3.85$ нм для всех размеров оснований КТ. Важно отметить, что этот набор параметров КЯ был экспериментально обнаружен как наиболее эффективная конфигурация DWELL в работах 18,19,20.

Три кривые, показанные сплошной линией на рисунке 6, соответствуют геометриям КТ, которые выбраны по следующим соображениям. Во-первых, хорошо квантовые точки InAs на поверхности GaAs обычно имеют $\{101\}$ фасетки, что соответствует аспекту пирамиды $H/L = 0.5$ и длине основания $L = 18$ нм, если $H = 9$ нм. Во-вторых, объем и форма КТ изменяются в процессе зарастивания барьерным материалом^{25,26}, что изменяет огранку до $\{203\}$ – референтной формы КТ, полученной на основе микроскопии высокого разрешения⁷. Таким образом, мы получаем пирамидку с соотношением сторон пирамиды $H/L = 0.32$, длиной основания $L = 28$ нм и высотой $H = 9$ нм. В-третьих, анализ, проведенный в работе, показал, что оптимальное соотношение сторон 0.2 обеспечивает наиболее глубокую локализацию носителей в квантовых точках InAs любого заданного объема, погруженных в GaAs. Для расчетов берем $L = 38$ нм, что соответствует $H/L = 0.24$ при неизменной высоте $H = 9$ нм.

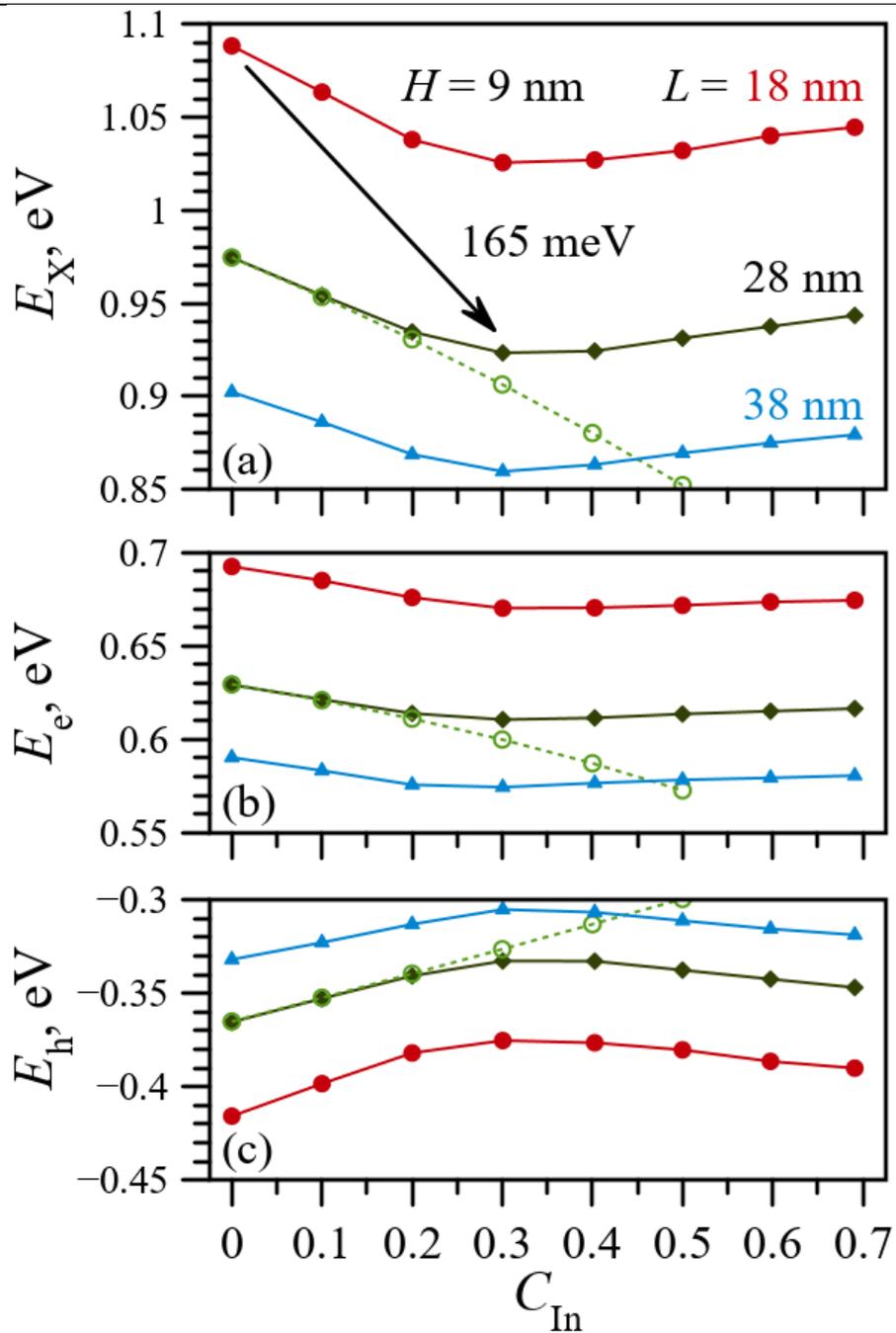


Рис. 6. Энергии экситона (а), электрона (б) и тяжелой дырки (в), локализованных в квантовых точках InAs, в зависимости от концентрации индия в квантовых ямах InGaAs. Высота КТ 9 нм. Зеленые, красные и синие кривые и точки соответствуют основанию КТ 18, 28 и 38 нм. Сплошные линии и символы рассчитаны для толщины QW, определенной формулой. 3. Светлые кружки и штриховые линии рассчитаны для толщины КЯ, равной высоте КТ.

Следует отметить, что, хотя малое значение соотношения сторон является термодинамически благоприятным для квантовых точек, фактическое соотношение сторон зависит технологической процедуры роста. В случае КТ на поверхности уменьшение соотношения сторон происходит при постоянном объеме КТ, поскольку при осаждении верхнего барьера GaAs внешний источник атомов индия отсутствует. В случае зарастивания квантовой ямой, имеется много индия, доступного для расширения базы квантовых точек во время осаждения квантовой ямы InGaAs. В этом случае изменение длины базы должно происходить при почти постоянной высоте КТ H . Это утверждение подтверждается исследованием ТЕМ при сравнении InAs QDB и DWELL^{23,18}.

Полная упругая энергия КТ пропорциональна ее объему, который растет с увеличением длины основания и постоянной высоты пирамиды. При достижении определенного критического объема упругая энергия должна релаксировать за счет образования петель дислокации несоответствия. Аналитическое рассмотрение сферической КТ приводит^{27, 28} к формуле для r_{cr} , аналогичной уравнению для r_{cr}

$$\frac{3b}{4\pi(1+\nu)h_{cr}} \ln \frac{\alpha h_{cr}}{b} = \varepsilon_m$$

Зависимость $r_{cr}(C_{In})$ показана на рисунок 5(a) красной кривой, где окрашенная область соответствует бездислокационным границам раздела. Соответствующий критический объем КТ показан как функция C_{In} на рисунке 5(b). Из расчетов следует, что для InAs QD (т.е. $C_{In} = 1$) критический объем близок к объему пирамиды с высотой $H = 9$ нм и основанием $L = 28$ нм ($V = 2352$ нм³). КТ с большим основанием термодинамически неустойчивы и вокруг них к будут образовываться дислокации несоответствия. Например, КТ высотой 9 нм и длиной основания 38 нм имеет объем в два раза больше критического. Таким образом, требования согласованности интерфейса накладывают сильные ограничения на состав и геометрию квантовых

точек и квантовых ям. Он устанавливает предел улучшения локализации носителей в DWELL по сравнению с незаряженной КТ.

Наибольшее красное смещение экситонного излучения пирамидальной квантовой точки InAs высотой $H = 9$ нм показано на рисунке 6(a) стрелкой. Оно составляет 165 мэВ и соответствует КЯ толщиной 3.85 нм при концентрации $C_{In} = 0.3$. Такая же конфигурация DWELL экспериментально оказалась наиболее эффективной. Расчетный сдвиг экситонного излучения на 165 мэВ хорошо согласуется с экспериментальным достижением Устинова и др. (160 мэВ)¹⁸.

Для понимания явления мы разложим полное значение красного смещения на вклады, связанные с модификацией поля напряжения-деформации из-за КЯ, увеличением объема КТ и изменением соотношения сторон КТ. Первое можно оценить из рисунка 6 как разность $E_X(C_{In} = 0) - E_X(C_{In} = 0.3) = (51 \div 63)$ мэВ.

Чтобы разрешить вклады объема и соотношения сторон, мы изменили последнее, в то время как объем квантовых точек остается постоянным. Результаты расчетов энергий локализованных электронов (E_e), дырок (E_h) и экситонов (E_X) показаны на рисунке 7. Объем эталонных квантовых точек InAs составляет 2352 нм³. На рисунке 6 это соответствует зеленым линиям для КТ с $H = 9$ нм и $L = 28$ нм. Синие полные кружки на рисунке 7(a) соответствуют DWELL с квантовой ямой InGaAs толщиной $h = 3.85$ нм при концентрации индия $C_{In} = 0.3$. Светлые кружки представляют собой КТ InAs в объемном GaAs. Для обоих случаев зависимости энергий носителей от аспектного отношения аналогичны со сдвигом на 51 мэВ, рассмотренным выше. Штриховая серая линия, соответствующая случаю КТ в объемном GaAs, наложенная поверх закрашенных синих точек (DWELL) демонстрирует соответствие зависимостей. Баланс вкладов квантовой механики и механики твердого тела обеспечивает ярко выраженный минимум энергии экситона при соотношении сторон около 0.2 как для QDB, так и для DWELL. Соотношение сторон, экспериментально наблюдаемое Устиновым и соавт. в случае DWELL – 0.32. Уменьшение энергии экситона в DWELL составляет 34 мэВ при уменьшении

аспектного отношения с 0.5 до 0.32. Полный красный сдвиг экситонного состояния составляет 85 мэВ при неизменном объеме КТ. Дальнейшее изменение формы до оптимального соотношения сторон могло бы дать дополнительный красный сдвиг энергии экситона на 11 мэВ до 96 мэВ.

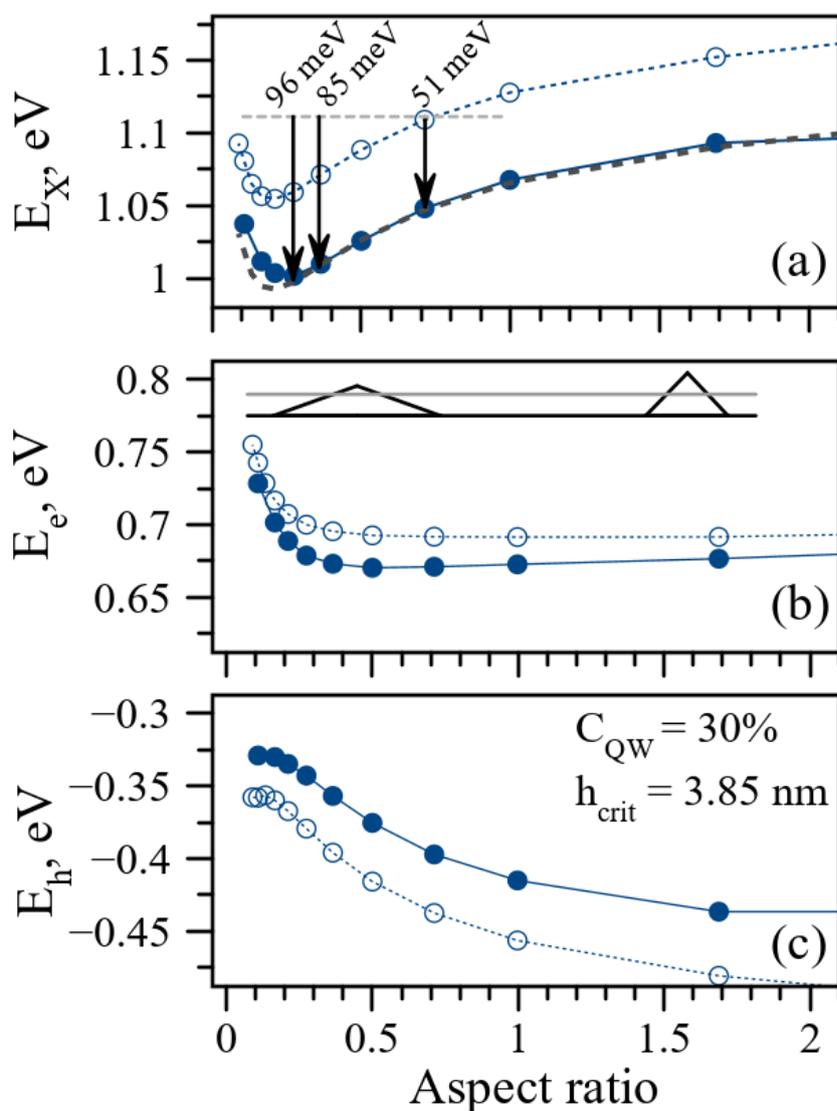


Рис. 7. Энергии экситона (а), электрона (б) и тяжелой дырки (в) в зависимости от аспектного отношения пирамидальных квантовых точек InAs с постоянным объемом. Сплошные и светлые кружки соответствуют случаям колодца и QDB соответственно.

Таким образом, мы разделили вклад объема 78 мэВ и аспектного отношения ~ 36 мэВ в красное смещение 114 мэВ, сопровождающее увеличение base L от 18 до 28

нм при осаждении квантовой ямы InGaAs. С дополнительным 51 мэВ из-за перераспределения поля напряжения-деформации общее улучшение локализации экситона достигает 165 мэВ. Полученное значение хорошо количественно согласуется с лучшими экспериментальными достижениями^{18,19}.

Наши расчеты предсказывают, что предел улучшения локализации экситонов для InAs-GaAs DWELL-системы по сравнению с InAs QDB составляет 176 мэВ. Когда объем квантовых точек строго ограничен требованиями когерентности интерфейса, максимально возможная локализация носителей может быть достигнута, при оптимальном соотношении сторон квантовых точек ~ 0.2 . Отметим, что уплощение КТ во время зарастания термодинамически выгодно и, следовательно, возможно.

Таким образом, в этой работе мы исследовали локализацию носителей заряда пирамидальной КТ, которая может быть усилена, если КТ помещена в КЯ. Показано, что в эффект вносят вклад три процесса: изменение поля деформаций, увеличение объема КТ и уменьшение соотношения сторон КТ. Общий эффект ограничен требованиями согласованности интерфейса как для QD, так и для QW. Мы анализируем поле деформаций-напряжений и условия когерентности для наиболее популярной DWELL, состоящей из квантовых точек InAs и InGaAs квантовых ям. Для этой системы было достигнуто очень хорошее количественное согласие между результатами наших расчетов и имеющимися экспериментальными данными. В оптимальной конфигурации DWELL общее влияние КЯ InGaAs на локализацию носителей заряда в КТ InAs может достигать 176 мэВ с точки зрения красного смещения энергии локализованного экситона. Мы разложили этот красный сдвиг энергии экситона на три составляющие, соответствующие увеличению объема КТ (78 \sim мэВ), уменьшению аспектного отношения квантовых точек (47 \sim мэВ) и перераспределению поля напряжений-деформаций, вызванному квантовой ямой (51 \sim мэВ). Очевидно, все три вклада важны для явления. Наши результаты качественно достоверны и могут быть легко адаптированы к любым аналогичным системам DWELL, таким как InAs-InP, GaSb-AlAs и т. Д.

Заключение

В этой работе рассматривались полупроводниковые квантовые точки, самоорганизованные методом Странского-Крастанова. На основе построенной численной модели было показано, что рассмотрение различных компонент тензора деформаций и ассоциированных с ними энергий позволяет достичь более глубокого понимания при анализе вклада упругих деформаций в профиль локализирующего потенциала носителей заряда в полупроводниковых наноструктурах. Было показано, что существует оптимальное соотношение сторон пирамидальной квантовой точки, соответствующее наибольшей глубине локализации носителей. На основе полученной модели были проанализированы наноструктуры типа квантовая точка в квантовой яме (DWELL). Экспериментальные данные различных авторов были интерпретированы в рамках полученной модели, а также было показано, что красное смещение спектров фотолюминесценции, полученное посредством выращивания квантовой ямы близко к максимально возможному, полученному в рамках нашей модели. Результаты работы являются универсальными и могут быть применены к широкому спектру полупроводниковых гетеропар.

Литература

¹ Zhores I. Alferov. Nobel Lecture: The double heterostructure concept and its applications in physics, electronics, and technology, Rev. Mod. Phys. 73, 767 (2001). Also: NobelPrize.org

² R. C. Ashoori, Electrons in artificial atoms. Nature 379, 413–419 (1996).

³ Ivan N. Stranski, Lubomir Krastanow, Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander. Abhandlungen der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Klasse IIb. Akademie der Wissenschaften Wien. 146, 797–810 (1938).

⁴ K. Brunner, Si/Ge nanostructures, Rep. Prog. Phys. 65, 27 (2001).

⁵ C. Adelmann, J. Simon, G. Feuillet, N. Pelekanos, B. Daudin, and G. Fishman, Self-assembled InGaN quantum dots grown by molecular-beam epitaxy, Appl. Phys. Lett. 76, 1570–1572 (2000).

-
- ⁶ N. A. Bert, A. L. Kolesnikova, V. N. Nevedomsky, V. V. Preobrazhenskii, M. A. Putyato, A. E. Romanov, V. M. Seleznev, B. R. Semyagin, and V.V. Chaldyshev, Formation of Dislocation Defects in the Process of Burying of InAs Quantum Dots into GaAs, *Semiconductors* 43(10), 1387–1393 (2009).
- ⁷ N. Cherkashin, S. Reboh, M. J. Hÿtch, A. Claverie, V. V. Preobrazhenskii, M. A. Putyato, B. R. Semyagin, and V. V. Chaldyshev, Determination of stress, strain, and elemental distribution within In(Ga)As quantum dots embedded in GaAs using advanced transmission electron microscopy, *Appl. Phys. Lett.* 102, 173115 (2013).
- ⁸ Y. Tu and J. Tersoff, Coarsening, Mixing, and Motion: The Complex Evolution of Epitaxial Islands, *Phys. Rev. Lett.* 98, 096103 (2007).
- ⁹ C. Teichert, Self-organization of nanostructures in semiconductor heteroepitaxy. *Physics Reports* 365, 335–432 (2002).
- ¹⁰ A. Rastelli, M. Kummer, and H. von Känel, Reversible Shape Evolution of Ge Islands on Si(001), *Phys. Rev. Lett.* 87, 256101 (2001).
- ¹¹ N. A. Bert, A. L. Kolesnikova, V. N. Nevedomsky, V. V. Preobrazhenskii, M. A. Putyato, A. E. Romanov, V. M. Seleznev, B. R. Semyagin, and V.V. Chaldyshev, Formation of Dislocation Defects in the Process of Burying of InAs Quantum Dots into GaAs, *Semiconductors* 43(10), 1387–1393 (2009).
- ¹² J. D. Eshelby, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 241, 376 (1957).
- ¹³ J. D. Eshelby, The elastic field outside an ellipsoidal inclusion. *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 241, 252, 561 (1959).
- ¹⁴ T. Mura, *Micromechanics of Defects in Solids* (Martinus Nijhoff, Boston, 1987).
- ¹⁵ N. A. Bert, A. L. Kolesnikova, A. E. Romanov, and V. V. Chaldyshev, Elastic Behavior of a Spherical Inclusion with a Given Uniaxial Dilatation, *Phys. Solid State* 44, 2240 (2002).
- ¹⁶ G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and deformation effects in semiconductors*. (John Wiley & Sons, New York, 1974).
- ¹⁷ O. Stier, M. Grundmann, and D. Bimberg, Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band k-p theory, *Physical Review B* 59, 5688 (1999).
- ¹⁸ V. M. Ustinov, N. A. Maleev, A. E. Zhukov, A. R. Kovsh, A. Y. Egorov, A. V. Lunev, B. V. Volovik, I. L. Krestnikov, Y. G. Musikhin, N. A. Bert, P. S. Kop'ev, Z.I. Alferov, N. N. Ledentsov, D. Bimberg, InAs/InGaAs quantum dot structures on GaAs substrates emitting at 1.3 μ m, *Applied Physics Letters* 74, 2815–2817 (1999)
- ¹⁹ K. Nishi, H. Saito, S. Sugou, J. Lee, A narrow photoluminescence linewidth of 21 meV at 1.35 μ m from strain-reduced InAs quantum dots covered by In_{0.2}Ga_{0.8}As grown on GaAs substrates, *Applied Physics Letters* 74, 1111–1113 (1999)
- ²⁰ H. Y. Liu, I. R. Sellers, T. J. Badcock, D. J. Mowbray, M.S. Skolnick, K. M. Groom, M. Guti'erez, M. Hopkinson, J. S. Ng, J. P. R. David, R. Beanland, Improved performance of 1.3 μ m multilayer

InAs quantum-dot lasers using a high-growth-temperature GaAs spacer layer, *Applied Physics Letters* 85, 704–706 (2004)

²¹ S. Wolde, Y. Lao, A. G. Unil Perera, Y. H. Zhang, T. M. Wang, J. O. Kim, T. Schuler-Sandy, Z. Tian, S. Krishna, Noise, gain, and capture probability of p-type InAs-GaAs quantum-dot and quantum dot-in-well infrared photodetectors, *Journal of Applied Physics* 121, 244501 (2017)

²² W. Li, S. Chen, J. Wu, A. Li, M. Tang, L. Yang, Y. Chen, A. Seeds, H. Liu, I. Ross, The effect of post-growth rapid thermal annealing on InAs/InGaAs dot-in-a-well structure monolithically grown on Si, *Journal of Applied Physics* 125, 13530 (2019)

²³ S. Ruvimov, P. Werner, K. Scheerschmidt, U. Gösele, J. Heydenreich, U. Richter, N. N. Ledentsov, M. Grundmann, D. Bimberg, V. M. Ustinov, A. Y. Egorov, P. S. Kop'ev, Z. I. Alferov, Structural characterization of (In,Ga)As quantum dots in a GaAs matrix, *Physical Review B* 51, 14766–14769 (1995)

²⁴ J. W. Matthews and A. E. Blakeslee, Defects in epitaxial multilayers: I. Misfit dislocations, *Journal of Crystal Growth* 27, 118 (1974)

²⁵ I. Daruka, J. Tersoff, A. Barabasi, Shape Transition in Growth of Strained Islands, *Physical Review Letters* 82, 2753–2756 (1999)

²⁶ R. Songmuang, S. Kiravittaya, O. Schmidt, Shape evolution of InAs quantum dots during overgrowth, *Journal of Crystal Growth* 249, 416–421 (2003)

²⁷ A. L. Kolesnikova, A. E. Romanov and V. V. Chaldyshev, Elastic energy relaxation in heterostructures with strained nanoinclusions *Phys. Solid State* 49, 667 (2007)

²⁸ V. V. Chaldyshev, N. A. Bert, A. L. Kolesnikova, A. E. Romanov, Stress relaxation scenario for buried quantum dots, *Physical Review B* 79, 233304 (2020)

Аспирант _____ Косарев Александр Николаевич