СОЗРЕВАНИЕ ПО ОСТВАЛЬДУ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ

Р.Д. Венгренович, С.В. Ярема, А.В. Москалюк
Черновицкий национальный университет им. Юрия Федьковича,
58012 Черновцы, Украина

К наиболее распространенному методу получения квантовых точек (КТ) относится метод гетероэпитаксиального роста в режиме Странского-Крастанова, когда вследствие явления самоорганизации послойный рост пленки сменяется образованием и последующим развитием наноструктур в виде объемных (3D) островков. Полученные таким способом КТ имеют совершенную кристаллическую структуру, высокий квантовый выход излучательной рекомбинации и характеризуются достаточно высокой однородностью по размерам. Размеры КТ могут колебаться от нескольких нанометров до нескольких сотен нанометров. Например, в гетеросистемах Ge-Si и InAs-GaAs размеры КТ колеблются от 10 до 100 нм с плотностью 10^{10}-10^{11} см $^{-2}$. В литературе, большое внимание уделяется распределению островков по размерам, поскольку этот параметр системы квантовых точек очень важен для практических применений. В частности, изменяя форму и размеры островков можно управлять их энергетическим спектром, что крайне важно для их технического применения. Чем более однородно распределение по размерам, при прочих равных условиях, тем привлекательней система квантовых точек в практическом отношении.

Однородность распределения по размерам удобно характеризовать среднеквадратическим отклонением $\sigma' = \sqrt{D}$, где D – дисперсия. Чем уже распределение по размерам, тем меньше σ'. Лучшие в этом отношении распределения по размерам получены для островков германия в гетеросистеме Ge/Si(001), для которых значения $\sigma < 10\%$ [1].

Теоретические распределения, соответствующие таким значениям дисперсии D или среднеквадратическим отклонениям σ', получены в работах [2-3] в предположении, что на поздних стадиях формирования островковой пленки, основным фактором, определяющим форму распределения островков по размерам есть оствальдовское созревание (ОС). Расчеты выполнены в рамках теории ЛСВ, при условии, что лимитирующим звеном ОС является дислокационная диффузия. При этом дислокационный механизм укрупнения островков в процессе ОС возможен, если поток вещества к островку за счет дислокационной диффузии намного больше потока за счет поверхностной диффузии, т.е.

$$D_s^{(d)} Zd \left(dC/dR \right)_{R=r} >> D_s 2\pi r \left(dC/dR \right)_{R=r} \tag{1}$$

где $D_s^{(d)}$ – коэффициент диффузии вдоль дислокационных канавок, D_s – коэффициент поверхностной диффузии, $\left(dC/dR \right)_{R=r}$ – градиент концентрации на поверхности островка, d – ширина дислокационной канавки, $d = 2\sqrt{2q/\pi}$, $b^2 \le q \le 60b^2$, где b – вектор Бюргерса, Z – число дислокационных линий, оканчивающихся у основания островка радиусом r $\left(Z \equiv const \right)$. Для упрощения расчетов, островки считаются дискообразными, постоянной высоты h [2]. Общий случай, когда изменяется h и r рассмотрен в [3].

Соотношение (1) накладывает ограничения на размеры островков, укрупняющихся посредством дислокационной диффузии

$$r << \frac{Zd}{2\pi} \frac{D_s^{(d)}}{D_s}. \tag{2}$$

Если условие (2) нарушается, то необходимо в общем потоке вещества, кроме потока за счет дислокационной диффузии, учитывать также и составляющую за счет поверхностной диффузии.

Настоящая работа посвящена определению функции распределения островков по размерам в условиях дислокационно-поверхностной диффузии, когда ни одним из потоков пренебрегать нельзя.

Для определения функции распределения островков по размерам *f(r,t)* необходимо знать скорость роста (растворения) островков.

Скорость роста отдельного островка, при условии, что $h = const$ определяется из уравнения

$$\frac{d}{dt}\left(\pi r^2 h\right) = j v_m, \tag{3}$$

где v_m – объем адатома, j – суммарный поток адатомов к островку.

В условиях дислокационно-поверхностной диффузии

$$j = j_d + j_s, \tag{4}$$

где j_d – поток к частице за счет диффузии вдоль дислокаций, j_s – поток за счет поверхностной диффузии, j_d и j_s – задаются соответственно левой и правой частью неравенства (1)

Обозначим через x и $(1-x)$ долю соответственно j_s и j_d в общем потоке j

$$x = \frac{j_s}{j},\ 1 - x = \frac{j_d}{j},\ \frac{j_d}{j_s} = \frac{1-x}{x}. \tag{5}$$

При x=0 имеем первый предельный случай, когда рост островков лимитируется диффузией вдоль дислокаций. Соответствующая функция распределения имеет вид [2]

$$g(u) = \frac{u^3 \exp\left[-\frac{1}{3(1-u)}\right] \exp\left[-\frac{1}{9\sqrt{2}} arctg \frac{u+1}{\sqrt{2}}\right]}{(1-u)^{25/9} (u^2 + 2u + 3)^{29/18}}. \tag{6}$$

При x=1, имеем второй предельный случай когда скорость роста лимитируется только поверхностной диффузией. Функция распределения островков по размерам в этом случае определяется распределением Лифшица–Слезова [4] модифицированным для поверхности [5].

$$g(u) = u^2 (1-u)^{-28/9} (u+2)^{-17/9} \exp\left(-\frac{2/3}{1-u}\right). \tag{7}$$

Теперь задача состоит в нахождении распределений по размерам между этими двумя предельными случаями.

Для определения *f(r,t)* согласно [6] ее представляют в виде произведения двух функций

$$f(r,t) = \varphi\left(r_g\right) \cdot g(u), \tag{8}$$

где $g(u)$ – распределение островков по относительным размерам $u = \frac{r}{r_g}$. Из закона сохранения массы *M* островкового конденсата находим $\varphi\left(r_g\right)$

$$M = K\int_0^{r_g} r^2 f(r,t)dr\,, \qquad (9)$$

где $K = \pi h\rho$, ρ – плотность островков. После подстановки (8) в (9) получаем

$$\varphi(r_g) = \frac{Q}{r_g^3},\;\; Q = \frac{M}{K\int_0^1 u^2 g(u)du}\,. \qquad (10)$$

Функцию распределения по относительным размерам $g(u)$ определяем из уравнения непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial t}(f(r,t)) + \frac{\partial}{\partial t}(f(r,t)\dot{r}) = 0\,. \qquad (11)$$

Если в (11) вместо $f(r, t)$ и $\dot{r}$ подставить их значения, а затем перейти от дифференцирования по r и t к дифференцированию по u, то в (11) разделяются переменные

$$\frac{dg(u)}{g(u)} = -\frac{3\upsilon_g + 2\frac{\upsilon}{u^3} - \frac{1}{u^2}\frac{d\upsilon}{du}}{u\upsilon_g - \frac{\upsilon}{u^2}}du\,, \qquad (12)$$

где $\upsilon_g = \frac{dr_g}{dt}\frac{r_g^2}{A}$, $\upsilon = \left(\frac{x}{1-x}u+1\right)\left(\frac{4-x}{3-x}u-1\right)$. Подставив соответствующие значения после интегрирования получаем функцию распределения островков по относительным размерам в условиях дислокационно-поверхностной диффузии

$$g(u) = \frac{u^3(u^2+bu+c)^{\frac{D}{2}}}{(u-1)^K}\exp\left(\frac{F}{u-1}\right)\exp\left(\frac{\frac{E-Db}{2}}{\sqrt{c-\frac{b^2}{4}}}arctg\frac{u+b/2}{\sqrt{c-b^2/4}}\right), \qquad (13)$$

где

$$D = \frac{3c^2 + (x^2-4x+6b-6)c + 6b^2 + (4x^2-16x+14)b + 7x^2 - 28x + 19}{c^2 + (b+1)2c + b^2 + 2b + 1},$$

$$E = \frac{(3-D)c + (D-3)b^2 + (2b+1)D + x^2 - 4x - 3}{2+b},$$

$$F = D(b+1) - 3b - E\,,\;\; K = 6 - D\,. \qquad (14)$$

Список литературы

[1] Jian-hong Zhu, Brunner K., and Abstreiter G. Appl. Phys. Lett., **73**, Iss. 5, 620 (1998).
[2] Венгренович Р.Д., Гудыма Ю.В., Ярема С.В. ФТП, **35**, 1440 (2001).
[3] Vengrenovitch R.D., Gudyma Yu. V., Yarema S.V. Phys.stat.sol. (b), **242,** 881 (2005).
[4] Lifshits I.M., Slezov V.V. J. Phys. Chem. Solids., **19**, 35 (1961).
[5] Венгренович Р.Д. УФЖ, **22**, 219 (1977).
[6] Vengrenovitch R.D. Acta metall., **30** 1079 (1982).