УДК 538.95

Курилюк В.В.[1], к.ф.-м.н.

Вплив ступеня неоднорідності на пружно-напружений стан самоорганізованих SiGe квантових точок

Методом скінченних елементів проведено розрахунки пружних полів в неоднорідних SiGe самоорганізованих квантових точках. Виявлено відмінності цих полів у порівнянні з нанооствівцями постійного складу. Результати розрахунків засвідчують, що величина деформацій в квантових точках зменшується із ростом ступеня їх неоднорідності.

Ключові слова: гетероструктура, квантова точка, пружна деформація, неоднорідність.

[1] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: kuryluk@univ.kiev.ua

V.V. Kuryliuk[1], Ph.D.

Influence of the degree of inhomogeneity on the elastic-stress state of the self-assembled SiGe quantum dots

Finite - element calculations are used to study strain fields in inhomogeneous SiGe self - assembled quantum dots. Such strain fields are found to be quite different from those of homogeneous nanoislands. Numerical results show that the elastic strain in quantum dots decreases with increasing of the degree of inhomogeneity.

Key words: heterostructure, quantum dot, elastic strain, inhomogeneity.

[1] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: kuryluk@univ.kiev.ua

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А .

Вступ

В даний час гетероструктури Si/SiGe з самоорганізованими квантовими точками (нанооствівцями) розглядаються як перспективні матеріали для створення високоефективних фотоелектричних перетворювачів [1]. Зацікавленість в зазначених структурах підсилюється також можливістю суміщення процесу їх вирощування з уже існуючою кремнієвою технологією виготовлення приладів та схем.

Рушійною силою процесу самоорганізації нанооствівців SiGe на кремнієвих підкладках та основним фактором, що визначає морфологію і фізичні властивості Si/SiGe гетероструктур з квантовими точками є пружні деформації та супутні поля механічних напружень [2]. Виникнення пружних деформацій в гетероструктурах з самоорганізованими квантовими точками пов'язане з невідповідністю сталих кристалічної решітки матеріалів підкладки та острівців.

Оскільки величина і знак пружних полів всередині гетероструктур можуть змінюватись на відстанях декілька нанометрів [3], то їх експериментальні дослідження спряжені з певними труднощами і дозволяють оцінити лише усереднені значення деформацій в нанооствівцях та їх околі [4]. Враховуючи вищезазначене, велика увага в сучасній літературі приділяється теоретичним дослідженням напружених гетероструктур з самоорганізованими квантовими точками за допомогою сучасних методів комп'ютерного моделювання. Серед найпоширеніших - методи функцій Гріна [5], молекулярної динаміки [6] та скінченних елементів [7].

Моделювання напружених гетероструктур з квантовими точками зазвичай виконується в припущенні про їх однорідний компонентний склад. Проте, численні експериментальні дані вказують на те, що в процесі епітаксії відбувається перемішування матеріалів підкладки та нанооствівців [8], в результаті чого в них спостерігаються неоднорідності. Ступінь неоднорідності квантових точок визначається в основному умовами епітаксії, зокрема, температурою.

В даній роботі в рамках моделі пружного континууму проведено розрахунки полів пружних деформацій для Si/SiGe гетероструктур з квантовими точками різного ступеня неоднорідності. Чисельні розрахунки виконано з використанням методу скінченних елементів. Проведено порівняння отриманих даних з результатами для острівців постійного компонентного складу.

© В.В. Курилюк, 2013

Методика розрахунку

Для моделювання впливу неоднорідності на пружно-напружений стан нанооствівців SiGe в роботі розглядалась одинична комірка (рис. 1), що містила кремнієву підкладку з поперечними розмірами $L_x \times L_x$ і товщиною L_z, на якій розміщена квантова точка $Si_{1-x}Ge_x$ (x – масова частка Ge в сполуці) в формі правильної піраміди. Довжина основи і висота піраміди відповідно дорівнюють a та h. Осі Ox, Oy, Oz співпадають з кристалографічними напрямками

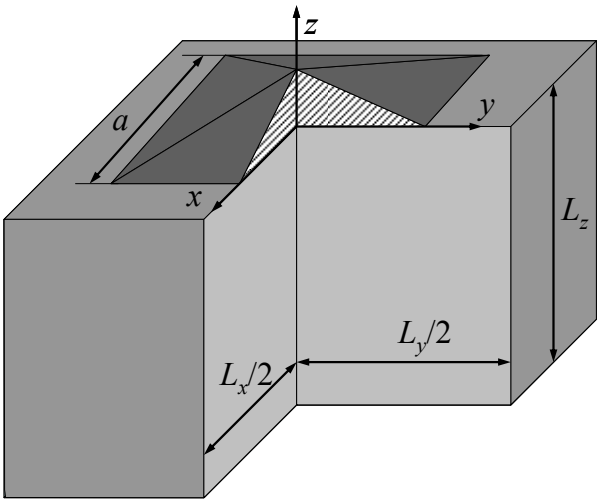

Рис. 1. Геометрія досліджуваної гетероструктури.

[100], [010] та [001], відповідно.

За допомогою методу скінченних елементів для досліджуваної структури розв'язувалась система рівнянь теорії пружності:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = 0, \\ T_{ij} = C_{ijkl}\left[S_{kl} - S_{0kl}\right], \\ S_{kl} = \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_k}{\partial x_l} + \dfrac{\partial u_l}{\partial x_k}\right), \end{cases} \qquad (1)$$

де T_{ij}, S_{kl}, C_{ijkl} – тензори механічних напружень, деформацій та пружних сталих, u_i – вектор пружних зміщень, а S_{0kl} – початкові деформації, зумовлені невідповідністю решіток. Для гетеропари Si / $Si_{1-x}Ge_x$ $S_{0kl} = -0.04 \cdot x \cdot \delta_{kl}$.

Реальні гетероструктури містять великі масиви нанооствівців, що характеризуються певною впорядкованістю і періодичністю. Для врахування періодичності в даній роботі використовувались відповідні граничні умови для одиничної комірки: на її протилежних x- та y-гранях фіксувались нормальні складові вектора пружних зміщень. Нижня грань підкладки вважалась «затиснутою», а на всіх вільних поверхнях підкладки і квантової точки припускалась відсутність механічних напружень.

Неоднорідність складу нанооствівців в роботі задавалась шляхом варіації вмісту германію x всередині них. Використовувався розподіл x, аналогічний до того, що був отриманий раніше в роботі [9]. Максимальне значення $x_{\max}$ поблизу вершини квантової точки вибиралось фіксованим $x_{\max}=1$, а мінімальне $x_{\min}$ поблизу вершин при основі острівців варіювалось в межах $0 < x_{\min} < 1$. Для характеристики неоднорідності нанооствівців в роботі введено ступінь неоднорідності Δx, що визначається наступним співвідношенням:

$$\Delta x = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{x_{\max}}. \qquad (2)$$

Результати та їх обговорення

На рис. 2 представлено розраховані залежності компоненти S_{xx} (S_{yy}) (деформації в площині гетеропереходу) від координати z, що співпадає з напрямком росту гетероструктури, при різних значеннях ступеня неоднорідності Δx. На цьому і подальших рисунках від'ємні значення z відповідають області кремнієвої підкладки, а додатні - $Si_{1-x}Ge_x$ квантової точки.

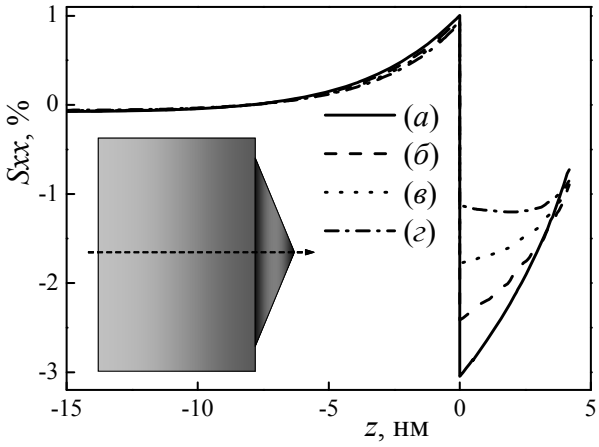

Рис. 2. Розподіли деформацій S_{xx} вздовж осі z (пунктирна лінія на вставці) при різних значеннях ступеня неоднорідності Δx квантових точок: (*а*) – 0; (*б*) – 0.3; (*в*) – 0.6; (*г*) – 0.9.

Видно, що нанооствівці зазнають деформації стиснення вздовж гетерограниці Si/ $Si_{1-x}Ge_x$, тоді як кремнієва підкладка виявляється розтягнутою в площині гетеропереходу. Максимальні деформації розтягу в підкладці не перевищують 1% і швидко загасають вглибину на відстанях порядку висоти нанооствівців.

Максимальні стискуючі деформації S_{xx} в квантових точках локалізовані поблизу їх основи і поступово зменшуються при переході до вершини. В однорідних нанооствівцях (Δx=0, лінія (*а*) на рис. 2) максимальні деформації стиснення дорівнюють $S_{xx(\max)} \approx 3\%$. Зростання ступеня неоднорідності зумовлює зменшення величини $S_{xx(\max)}$: для квантових точок з Δx=0.9 відповідні деформації зменшуються втричі і складають приблизно 1% (лінія (*г*) на рис. 2). Іншим проявом неоднорідностей компонентного складу нанооствівців є зменшення градієнту деформацій всередині квантової точки без суттєвих їх змін в кремнієвій підкладці. Крім того, характерною особливістю неоднорідних

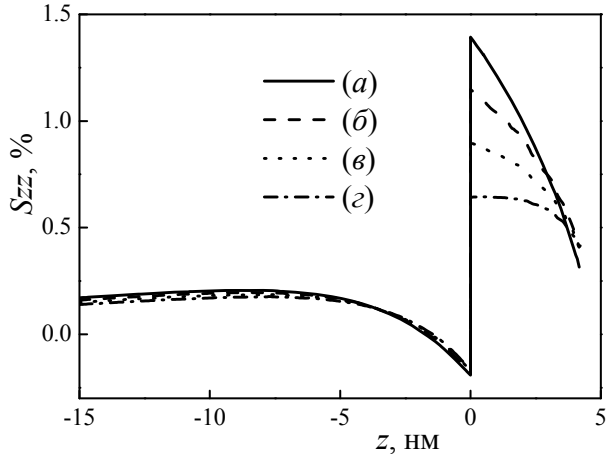

Рис. 3 Розподіли деформацій S_{zz} вздовж осі z при різних значеннях ступеня неоднорідності Δx квантових точок: (*а*) – 0; (*б*) – 0.3; (*в*) – 0.6; (*г*) – 0.9.

квантових точок є те, що при $z \geq h/3$ вони виявляються більш деформованими у порівнянні з однорідними нанооствівцями.

Внаслідок ефекту Пуассона деформації S_{zz} в напрямку росту гетероструктури мають протилежний знак: кремнієва підкладка виявляється стисненою вздовж осі Oz, а $Si_{1-x}Ge_x$ квантові точки характеризуються деформаціями розтягу (рис. 3). Максимум S_{zz} для однорідних острівців (лінія (*а*) на рис. 3) виявляється поблизу гетеропереходу (≈ 1.4%) з поступовим зменшенням при наближенні до вершини піраміди (≈ 0.3%).

Як і для компоненти S_{xx}, деформації S_{zz} всередині нанооствівців зменшуються при збільшенні ступеня їх неоднорідності. Для

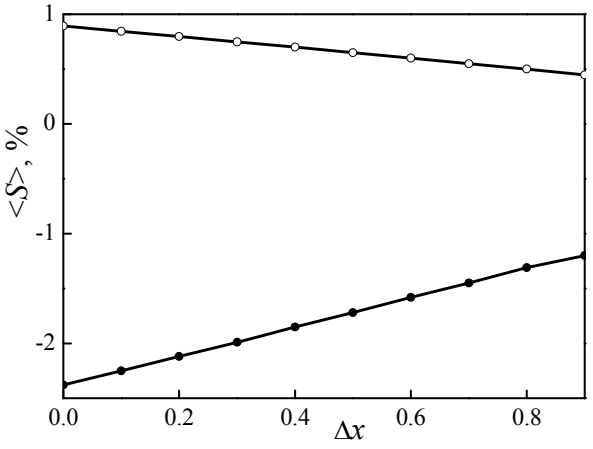

Рис. 4 Залежність усереднених по об'єму квантових точок деформацій $\langle S_{xx}\rangle$ ($\langle S_{yy}\rangle$) (темні точки) та $\langle S_{zz}\rangle$ (світлі точки) від ступеня неоднорідності Δx.

суттєво неоднорідних квантових точок (Δx=0.9) максимальні деформації розтягу в острівцях не перевищують 0.6% (лінія (*г*) на рис. 3) Верхня третина неоднорідної квантової точки характеризується незначним перевищенням деформацій у порівнянні з однорідними острівцями.

Оскільки в експериментах зазвичай реєструються усереднені деформації в гетероструктурах, то в даній роботі проводились також розрахунки середніх деформацій $\langle S_{xx}\rangle$ та $\langle S_{zz}\rangle$ по об'єму V_{QD} квантових точок:

$$\left\langle S_{ii} \right\rangle = \frac{1}{V_{QD}} \int_{V_{QD}} S_{ii}(x,y,z)dV \,. \qquad (3)$$

Результати розрахунків представлено на рис. 4. Видно, що зростання неоднорідності нанооствівців спричинює зменшення механічних напружень в них за лінійним законом. При цьому більш чутливими до неоднорідностей виявляються складові $\langle S_{xx}\rangle$ ($\langle S_{yy}\rangle$): кутовий коефіцієнт залежності $\langle S\rangle(\Delta x)$ для них складає 1.32, тоді як для компоненти $\langle S_{zz}\rangle$ - лише 0.49.

Подібна поведінка пояснюється тим, що в структурах з непокритими квантовими точками джерелом механічних напружень є саме

деформації невідповідності в площині гетеропереходу, тоді як деформації в напрямку росту гетероструктури є одним з каналів релаксації вказаних напружень. Отже, у відповідності зі співвідношенням Пуассона величина деформацій $<S_{zz}>$ буде меншою.

Таким чином, в даній роботі проведено розрахунки полів пружних деформацій в гетероструктурах з $Si_{1-x}Ge_x$ квантовими точками неоднорідного компонентного складу. Показано, що перемішування Si та Ge зумовлює зниження пружних напружень в нанооствівцях, причому максимально чутливими до змін компонентного складу острівців є деформації в площині гетеропереходу підкладка - квантова точка. Можна очікувати, що виявлені особливості в напружених неоднорідних квантових точках позначатимуться і на електронних властивостях гетероструктур.

Список використаних джерел

1. *Lin C.-H.* Broadband SiGe/Si quantum dot infrared photodetectors / *C.-H. Lin, C.-Y. Yu, C.-Y. Peng, W. S. Ho, and C. W. Liu*. // Journal of Applied Physics. – 2007. – V.101, №3. – P.033117(4 pages).
2. *Brunner K.* Si/Ge nanostructures / *K. Brunner* // Reports on Progress in Physics. – 2002. – V.65, №1. – P.27-72.
3. *Goldshtein R.V.* On modeling the mechanical behavior of heterostructures with quantum dots / *R. V. Goldshtein, V. A. Gorodtsov, and P. S. Shushpannikov*// Russian Physics Journal. – 2009. – V.52, №11. – P.1177-1185.
4. *Alonso M.I.* Strain and composition profiles of self-assembled Ge/Si(001) islands / M.I. Alonso, M. de la Calle, J.O. Osso, M. Garriga, and A. R. Goni // Journal of Applied Physics. – 2005. – Vol. 98, № 3. – P. 033530 (6 pages).
5. *Melezhik E.* Elastic fields of quantum dots in semi-infinite matrices: Green's function analytical analysis / E. Melezhik, and O. Korotchenkov Journal of Applied Physics. – 2009. – Vol. 105, № 2. – P. 023525 (5 pages).
6. *Kikuchi Y.* Strain profiles in pyramidal quantum dots by means of atomistic simulation / Y. Kikuchi, H. Sugii, and K. Shintani // Journal of Applied Physics. – 2001. – Vol. 89, № 2. – P. 1191 (6 pages).
7. *Liu G.R.* A finite element study of the stress and strain fields of InAs quantum dots embedded in GaAs / G.R. Liu, and S.S. Quek Jerry // Semiconductor Science and Technology. – 2002. – Vol. 17, № 2. – P. 630-643.
8. *Valakh M. Ya.* Gigantic uphill diffusion during self-assembled growth of Ge quantum dots on strained SiGe sublayers / M. Ya. Valakh, P. M. Lytvyn, A. S. Nikolenko, V. V. Strelchuk, Z. F. Krasilnik, D. N. Lobanov, and A. V. Novikov // Applied Physics Letters. – 2010. – V.96, №14. – P. 141909 (3 pages).
9. *Medhekar N.V.* Composition Maps in Self-Assembled Alloy Quantum Dots / N.V. Medhekar, V. Hegadekatte, and V. B. Shenoy // Physical Review Letters. – 2008. – Vol. 100, № 10. – P. 106104 (4 pages).

Надійшла до редколегії 05.02.13