

МОДЕЛЮВАННЯ ДЕФОРМАЦІЇ ГЕТЕРОСТРУКТУРИ InAs/GaAs З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ InAs ПІД ВПЛИВОМ АКУСТИЧНОЇ ХВИЛІ

Р. М. Пелещак, О. О. Даньків, О. В. Кузик

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
вул. Івана Франка, 24, м. Дрогобич, 82100, e-mail: peleshchak@rambler.ru*

(Отримано 22 червня 2010 р.; в остаточному вигляді — 2 жовтня 2010 р.)

Побудовано механіко-деформаційну модель наногетеросистеми з квантовими точками, що зазнає впливу акустичної хвилі. Розраховано всебічну деформацію гетероструктури InAs/GaAs з квантовими точками InAs. Запропонований підхід ураховує як напруження, спричинені невідповідністю параметрів ґраток контактуючих матеріалів, так і вплив акустичної хвилі на напружений стан гетеросистеми з квантовими точками.

Ключові слова: квантова точка, акустична хвиля, деформація.

PACS number(s): 43.35.+d, 62.23.Eg

I. ВСТУП

Останніми роками значно зріс дослідницький інтерес до напівпровідникових гетероструктур InAs/GaAs з нульвимірними напруженими наноб'єктами InAs (квантовими точками (КТ)) [1–3]. Такі наноб'єкти мають високий квантовий вихід фотолюмінесценції і є перспективним матеріалом для створення лазерів у близькій інфрачервоній області спектра [4]; *p-n* структур на напруженій гетеромезі квантова точка — матриця [5]; квантових комп'ютерів [6] та багатомодового лазера. Один із важливих напрямків досліджень — це можливість керувати частотою випромінювання гетеролазерів на основі КТ.

Вагомим фактором, який впливає на спектральні характеристики випромінювання гетероструктур InAs/GaAs із квантовими точками InAs, є пружна деформація матеріалу таких структур. Так, у праці [7] досліджено вплив поля внутрішньої пружної деформації, яка є наслідком як невідповідності параметрів ґраток, так і різних термічних коефіцієнтів між КТ InAs та матричним матеріалом GaAs, на енергетичний спектр носіїв заряду. Однак зовнішні напруження також можуть впливати на електронну підсистему в напівпровідникових гетероструктурах, зокрема змінювати ширину забороненої зони, енергетичний спектр носіїв струму і, відповідно, частоту генерації випромінювання. Суттєвим також є вплив термічних напружень, які зумовлені коливанням поверхні нанокластерів під дією модульованого світлового потоку, на генерацію звуку ансамблем квантових точок [8, 9]. У цій статті розраховано компоненти тензора деформації матеріалів квантової точки та матриці, що піддаються впливу акустичної хвилі.

II. МОДЕЛЬ

У поданій задачі розглянуто наногетеросистему InAs/GaAs з напруженими сферичними квантовими точками InAs.

Оскільки постійна ґратки нарощуваного матеріалу InAs ($a_1 = 0.608$ нм) більша, ніж матриці GaAs ($a_2 = 0.565$ нм), то при гетероепітаксійному нарощуванні в межах псевдоморфного росту InAs на шар GaAs матеріал InAs зазнає деформації стиску, а GaAs — розтягу. Таким чином, сферичну квантову точку радіусом R_0 можна представити пружним дилатаційним мікрровключенням у вигляді пружної сфери (рис. 1, суцільна тонка лінія), поміщеної у сферичну порожнину (пунктирна лінія) у матриці GaAs радіусом R_1 , об'єм якої менший за об'єм мікрровключення на ΔV . Щоб вкласти таке сферичне мікрровключення, необхідно його стиснути й розтягнути оточуючу матрицю GaAs в радіальних напрямках. Результат одночасної дії деформацій контактуючих наноматеріалів (суцільна товста лінія на рис. 1) описується зміною об'єму ΔV через параметр f [10]:

$$\Delta V(R_0, R_1) = f(R_0, R_1) \cdot 4\pi R_0^3. \quad (1)$$

Параметр f виражає неузгодження сталих ґраток a_1 , a_2 у наноматеріалах InAs та GaAs [7].

Під дією акустичної хвилі в матеріалі наногетеросистеми виникає періодичне деформаційне поле.

Щоб визначити компоненти тензора деформації, необхідно знайти вектори зміщень атомів $\mathbf{u}^{(i)}(\mathbf{r}, t)$ ($i = \begin{cases} 1 \equiv \text{InAs} \\ 2 \equiv \text{GaAs} \end{cases}$) в матеріалах квантової точки та матриці, які задовольняють рівняння:

$$\rho^{(i)} \frac{\partial^2 u_n^{(i)}}{\partial t^2} = \sum_j \frac{\partial \sigma_{nj}^{(i)}}{\partial x_j}, \quad (2)$$

де $\rho^{(i)}$, $\sigma_{nj}^{(i)}$ — густина й компоненти тензора напружень матеріалів квантової точки та матриці відповідно.

$$\sigma_{nj}^{(i)} = K^{(i)} \left(\sum_k \varepsilon_{kk}^{(i)} \right) \delta_{nj} + 2\mu^{(i)} \left(\varepsilon_{nj}^{(i)} - \delta_{nj} \frac{1}{3} \sum_k \varepsilon_{kk}^{(i)} \right), \quad (3)$$

де $K^{(i)}, \mu^{(i)}$ — модулі всебічного стиску і зсуву матеріалу КТ та оточуючої матриці, які виражаються через пружні сталі $C_{11}^{(i)}$ та $C_{12}^{(i)}$ цих матеріалів [11]:

$$K^{(i)} = \frac{C_{11}^{(i)} + 2C_{12}^{(i)}}{3}, \quad \mu^{(i)} = \frac{C_{11}^{(i)} - C_{12}^{(i)}}{2};$$

$\varepsilon_{nj}^{(i)}$ — компоненти тензора деформації:

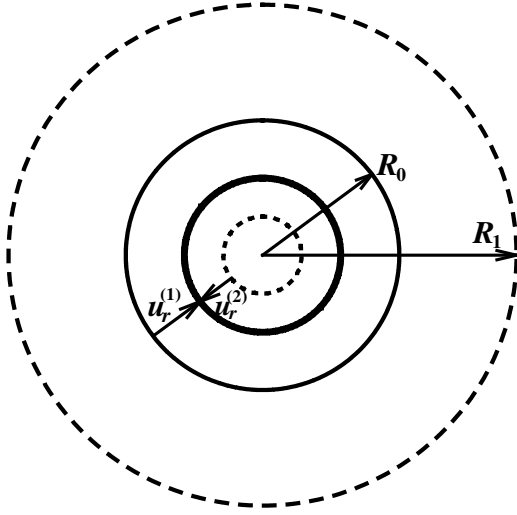


Рис. 1. Модель напруженої сферичної квантової точки.

$$\varepsilon_{nj}^{(i)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_n}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_n} \right). \quad (4)$$

Запишемо вектори зміщень $\mathbf{u}^{(i)}(\mathbf{r}, t)$ у вигляді сум двох доданків $\mathbf{u}^{(i)}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}_l^{(i)}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{u}_T^{(i)}(\mathbf{r}, t)$, які задовольняють умови:

$$\text{rot } \mathbf{u}_l^{(i)}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \text{div } \mathbf{u}_T^{(i)}(\mathbf{r}, t) = 0.$$

У результаті отримаємо:

$$\Delta \mathbf{u}_l^{(i)} = \frac{1}{c_l^{(i)2}} \frac{\partial^2 \mathbf{u}_l^{(i)}}{\partial t^2}, \quad \Delta \mathbf{u}_T^{(i)} = \frac{1}{c_T^{(i)2}} \frac{\partial^2 \mathbf{u}_T^{(i)}}{\partial t^2}, \quad (5)$$

де $c_l^{(i)} = \sqrt{\frac{3K^{(i)} + 4\mu^{(i)}}{3\rho^{(i)}}}$, $c_T^{(i)} = \sqrt{\frac{\mu^{(i)}}{\rho^{(i)}}}$ — поздовжні та поперечні швидкості акустичних коливань у матеріалах квантової точки та матриці. Поперечна акустична хвиля ($\mathbf{u}_T^{(i)}$) в (5) не приводить до зміни об'єму [12], оскільки $\text{div } \mathbf{u}_T^{(i)}(\mathbf{r}, t) = 0$. Поширення поздовжньої хвилі супроводжується об'ємним розширенням та стиском.

Пружні коливання в гетеросистемі з квантовими точками розглядатимемо на фоні статичних напружень, що виникають за рахунок невідповідності параметрів ґраток контактуючих матеріалів. Запишемо зміщення у вигляді:

$$\mathbf{u}^{(i)}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}_0^{(i)}(\mathbf{r}) + \mathbf{u}_{1l}^{(i)}(\mathbf{r}, t), \quad (6)$$

де $\mathbf{u}_0^{(i)}(\mathbf{r})$ — статичні зміщення в матеріалі квантової точки та матриці, що задовольняють рівняння рівноваги [12]

$$\nabla \text{div } \mathbf{u}_0^{(i)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (7)$$

із такими граничними умовами:

$$\begin{cases} 4\pi R_0^2 \left(u_{0r}^{(2)}|_{r=R_0} - u_{0r}^{(1)}|_{r=R_0} \right) = \Delta V, \\ \sigma_{0rr}^{(1)}|_{r=R_0} = \sigma_{0rr}^{(2)}|_{r=R_0} - P_L, \\ \sigma_{0rr}^{(2)}|_{r=R_1} = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Ліва частина першого з рівнянь системи (8) дорівнює геометричній різниці об'ємів ΔV мікрровключення та порожнини в матриці GaAs, зображених на рис.1; $P_L = \frac{2\alpha}{R_0}$ — лапласівський тиск, де α — поверхнева енергія КТ (InAs), яка визначається з умови:

$$\int_0^{R_1} \rho^{(i)} c_l^{(i)2} \varepsilon^{(i)2}(r) r^2 dr = \alpha \Delta S,$$

де $\Delta S = 2\pi R_0 u^{(1)}(R_0)$ — зміна площі поверхні КТ; $\varepsilon^{(i)}$ — всебічна деформація матеріалів КТ та матриці.

Другий доданок у (6) ($\mathbf{u}_{1l}^{(i)}(\mathbf{r}, t)$) — це динамічні зміщення в матеріалах квантової точки та матриці, спричинені дією акустичної хвилі.

Оскільки розглядається сферично-симетрична система, тобто вектор зміщення має лише радіальну компоненту u_r , то радіальне напруження матиме вигляд:

$$\sigma_{rr}^{(i)} = \left(K^{(i)} + \frac{4}{3}\mu^{(i)} \right) \frac{\partial u_r^{(i)}}{\partial r} + \left(K^{(i)} - \frac{2}{3}\mu^{(i)} \right) \frac{2u_r^{(i)}}{r}. \quad (9)$$

Розв'язок рівняння (7) з урахуванням умов (8) при забезпеченні скінченності зміщення в точці $r = 0$ у випадку сферичних КТ має вигляд:

$$u_{0r}^{(1)} = C_1 r, \quad 0 \leq r \leq R_0, \quad (10)$$

$$u_{0r}^{(2)} = C_2 r + C_3 \frac{1}{r^2}, \quad R_0 \leq r \leq R_1, \quad (11)$$

де сталі інтегрування C_1, C_2, C_3 визначаються з умов (8).

Перейшовши до скалярного потенціалу $\mathbf{u}_{1l}^{(i)} = \nabla \varphi^{(i)}$, рівняння (5) з врахуванням (6) можна записати так:

$$\Delta \varphi^{(i)} = \frac{1}{c_l^{(i)2}} \frac{\partial^2 \varphi^{(i)}}{\partial t^2}. \quad (12)$$

Розв'язок рівняння (12) для матеріалів квантової точки та матриці матиме такий вигляд:

$$\varphi^{(1)} = \frac{A_1 \sin \left(\omega t - \frac{\omega r}{c_l^{(1)}} + \alpha_1 \right)}{r}, \quad 0 \leq r \leq R_0, \quad (13)$$

$$\varphi^{(2)} = \frac{A_2 \sin \left(\omega t - \frac{\omega r}{c_l^{(2)}} + \alpha_2 \right)}{r}, \quad R_0 \leq r \leq R_1, \quad (14)$$

де константи A_1 , A_2 , α_1 , α_2 вибираються так, щоб виконувались умови

$$\begin{cases} \sigma_{1rr}^{(1)}(t)|_{r=R_0} = \sigma_{1rr}^{(2)}(t)|_{r=R_0}; \\ \sigma_{1rr}^{(2)}(t)|_{r=R_1} = -\sigma_{us} \sin \omega t. \end{cases} \quad (15)$$

Остання гранична умова системи (15) визначає вплив акустичної хвилі на напружений стан наносистеми як дію періодичної вимушуючої сили з частотою ω , де σ_{us} — амплітуда механічної напруги, створеної акустичною хвилею на поверхні матриці.

Отже, враховуючи (9), (13)–(15), а також те, що $u_r^{(i)} = \frac{\partial \varphi^{(i)}}{\partial r}$, отримаємо вираз для радіальних складників вектора зміщень у квантовій точці та матриці:

$$u_r^{(1)}(r, t) = C_1 r - A_1 \left(\frac{\sin \left(\omega t - \frac{\omega r}{c_l^{(1)}} + \alpha_1 \right)}{r^2} + \frac{\omega \cos \left(\omega t - \frac{\omega r}{c_l^{(1)}} + \alpha_1 \right)}{r c_l^{(1)}} \right), \quad (16)$$

$$u_r^{(2)}(r, t) = C_2 r + \frac{C_3}{r^2} - A_2 \left(\frac{\sin \left(\omega t - \frac{\omega r}{c_l^{(2)}} + \alpha_2 \right)}{r^2} + \frac{\omega \cos \left(\omega t - \frac{\omega r}{c_l^{(2)}} + \alpha_2 \right)}{r c_l^{(2)}} \right), \quad (17)$$

$$\text{де } A_1 = -\frac{R_1}{\rho^{(1)}} \frac{\sigma_{us}}{\sqrt{(\omega_{01}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_1^2 \omega^2}}, \quad \alpha_1 = \frac{\omega R_0}{c_l^{(1)}} - \frac{\omega R_0}{c_l^{(2)}} + \frac{\omega R_1}{c_l^{(2)}} + \arctg \frac{2\gamma_1 \omega}{\omega^2 - \omega_{01}^2},$$

$$A_2 = -\frac{R_1}{\rho^{(2)}} \frac{\sigma_{us}}{\sqrt{(\omega_{02}^2 - \omega^2)^2 + 4\gamma_2^2 \omega^2}}, \quad \alpha_2 = \frac{\omega R_1}{c_l^{(2)}} + \arctg \frac{2\gamma_2 \omega}{\omega^2 - \omega_{02}^2},$$

$$\omega_{01} = \frac{2c_T^{(1)}}{R_0}, \quad \omega_{02} = \frac{2c_T^{(2)}}{R_1}, \quad \gamma_1 = \frac{2c_T^{(1)2}}{R_0 c_l^{(1)}}, \quad \gamma_2 = \frac{2c_T^{(2)2}}{R_1 c_l^{(2)}}.$$

III. ЧИСЛОВИЙ РОЗРАХУНОК УСЕБІЧНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ ГЕТЕРОСТРУКТУРИ InAs/GaAs ІЗ КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ InAs

З отриманих виразів (16) та (17) можна визначити компоненти тензора деформації й усебічну деформацію матеріалів квантової точки та матриці:

$$\varepsilon_{rr}^{(i)} = \frac{\partial u_r^{(i)}}{\partial r^{(i)}}, \quad \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)} = \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(i)} = \frac{u_r^{(i)}}{r^{(i)}}, \quad \text{Sp } \varepsilon^{(i)} = \varepsilon_{rr}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)} + \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(i)}. \quad (18)$$

Підставивши (16) та (17) у (18), одержимо вираз для просторового розподілу усебічної деформації в системі матриця — квантова точка з урахуванням впливу акустичної хвилі:

$$\text{Sp } \varepsilon^{(1)}(r, t) = 3\eta K^{(2)} (R_0^3 - R_1^3) - A_1 \left(\frac{\omega}{c_l^{(1)}} \right)^2 \frac{\sin \left(\omega t - \frac{\omega r}{c_l^{(1)}} + \alpha_1 \right)}{r}, \quad (19)$$

$$\text{Sp } \varepsilon^{(2)}(r, t) = 3\eta K^{(1)} R_0^3 - A_2 \left(\frac{\omega}{c_l^{(2)}} \right)^2 \frac{\sin \left(\omega t - \frac{\omega r}{c_l^{(2)}} + \alpha_2 \right)}{r}. \quad (20)$$

Числові розрахунки всебічної деформації проводили для наногетеросистеми InAs/GaAs з напруженими сферичними КТ InAs, параметри якої такі [11, 13, 14]: $R_1 = 50$ нм; $C_{11}^{(1)} = 0.833$ Мбар; $C_{12}^{(1)} = 0.453$ Мбар; $C_{11}^{(2)} = 1.223$ Мбар; $C_{12}^{(2)} = 0.571$ Мбар; $\rho^{(1)} = 5680$ кг/м³; $\rho^{(2)} = 5320$ кг/м³; $\sigma_{us} = 10$ бар.

На рис. 2 показано просторовий розподіл динамічного складника $\varepsilon_1(r)$ всебічної деформації матеріалів КТ та матриці в різні моменти часу при частоті акустичної хвилі 150 ГГц. Отриманий результат можна використати для розрахунку спектральних характеристик випромінювання гетеролазера на основі КТ [15], що зазнають впливу акустичних хвиль.

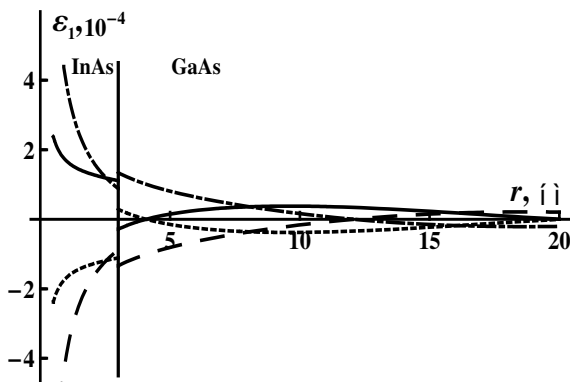


Рис. 2. Просторовий розподіл динамічного складника всебічної деформації $\varepsilon_1(r)$ у матеріалах КТ та матриці в різні моменти часу: $\omega t = 0$ (суцільна лінія), $\omega t = \frac{\pi}{2}$ (штрихова лінія), $\omega t = \pi$ (пунктирна лінія), $\omega t = \frac{3\pi}{2}$ (штрих-пунктирна лінія)

За проведеними числовими розрахунками побудовано залежність амплітуди змінної деформації $\varepsilon_{\max}^{(i)} = -A_i \left(\frac{\omega}{c_i}\right)^2 \frac{1}{R_0}$ в околі межі КТ — матриця в матеріалах КТ (рис. 3) та матриці (рис. 4) від частоти акустичної хвилі при різних розмірах КТ. Як бачимо, така залежність має немонотонний характер. Положення максимумів амплітуди деформації у квантовій точці суттєво залежить від її розміру. Зі збільшенням радіуса квантової точки спостерігаємо їх зміщення в бік менших частот (рис. 3), що зумовлено зменшенням частоти власних коливань [12] атомів квантової точки. Крім цього, збільшення радіуса квантової точки приводить до монотонного зменшення всебічної деформації. Це пояснюється тим, що квантові точки менших розмірів є чутливішими до впливу зовнішньої механічної напруги.

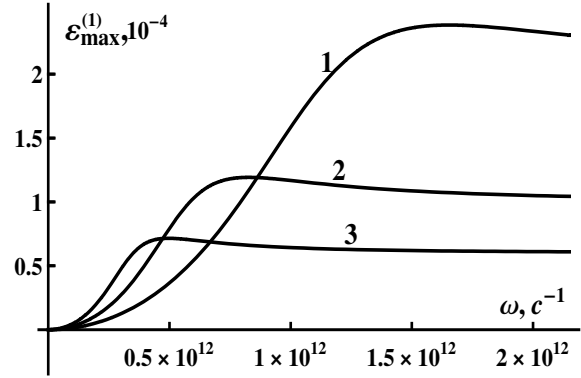


Рис. 3. Залежність амплітуди деформації матеріалу КТ (InAs) в точці $r = R_0$ від частоти акустичної хвилі для різних розмірів КТ: 1— $R_0 = 3$ нм; 2 — $R_0 = 6$ нм; 3 — $R_0 = 10$ нм

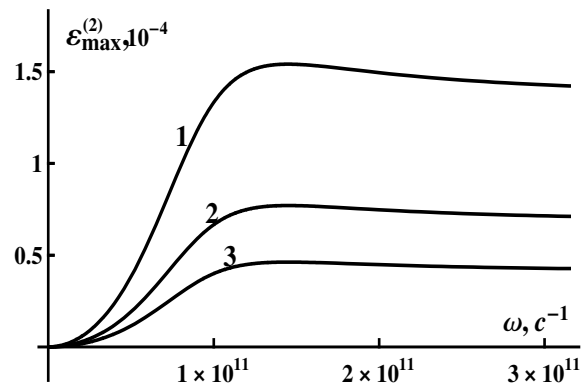


Рис. 4. Залежність амплітуди деформації матеріалу КТ (GaAs) в точці $r = R_0$ від частоти акустичної хвилі для різних розмірів КТ: 1— $R_0 = 3$ нм; 2 — $R_0 = 6$ нм; 3 — $R_0 = 10$ нм

IV. ВИСНОВКИ

1. Побудовано механіко-деформаційну модель наногетеросистеми з квантовими точками, що зазнає впливу акустичної хвилі. Розраховано всебічну деформацію гетероструктури InAs/GaAs з квантовими точками InAs.

2. Досліджено залежність деформації матеріалів КТ та матриці від частоти акустичної хвилі при різних розмірах КТ. Показано, що така залежність має немонотонний характер.

Автори висловлюють подяку чл.-кор. НАН України, професорові І. В. Стасюкові за слушні зауваження та обговорення результатів роботи

[1] Н. Н. Леденцов, В. М. Устинов, В. А. Шукин, П. С. Кошнев, Ж. И. Алфёров, Д. Бимберг, Физ. техн. полупр. **32**, 385 (1998).

[2] M. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mykhalova, R. Fartushynsky, Phys. Status Solidi B **225**, 331 (2001).

- [3] Г. Г. Зегря, О. В. Константинов, А. В. Матвеев, Физ. техн. полупр. **37**, 334 (2003).
- [4] М.-Н. Мао, F. Heinrichsdorff, A. Krost, D. Bimberg, Electron. Lett. **33**, 1641 (1997).
- [5] R. M. Peleshchak, I. Ya. Vachynsky, Condens. Matter Phys. **12**, 215 (2009).
- [6] M. Korkusinski, P. Nawrylak, Phys. Rev. B **63**, 195311 (2001).
- [7] О. О. Даньків, Р. М. Пелещак, Письма в журн. техн. физ. **31**, 33 (2005).
- [8] І. В. Блонський, Є. А. Єлисеєв, П. М. Томчук, Укр. фіз. журн. **45**, 1110 (2000).
- [9] И. В. Блонский, М. С. Бродин, Ю. П. Пирятинский, Г. М. Тельбиз, В. А. Тхорик, П. И. Томчук, А. Г. Филин, Журн. техн. физ. **107**, 1685 (1995).
- [10] К. Теодосиу, *Упругие модели дефектов в кристаллах* (Мир, Москва, 1985).
- [11] Ch. G. Van de Walle, Phys. Rev. B **39**, 1871 (1989).
- [12] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости* (Наука, Москва, 1965).
- [13] A. Qteish, R. J. Needs, Phys. Rev. B **45**, 1317 (1992).
- [14] N. Moll, M. Scheffler, E. Pehlke, Phys. Rev. B **58**, 4566 (1998).
- [15] Л. А. Кулакова, Физ. тверд. тела **47**, 2228 (2005).

THE MODELLING OF DEFORMATION OF THE InAs/GaAs HETEROSTRUCTURE WITH InAs QUANTUM DOTS UNDER THE INFLUENCE OF AN ACOUSTIC WAVE

R. M. Peleshchak, O. O. Dan'kiv, O. V. Kuzyk
*Ivan Franco Drohobych State Pedagogical University,
 24 Ivan Franco St., Drohobych, Lviv Region, 82100,
 e-mail: peleshchak@rambler.ru*

The mechanic-deformation model of a nanoheterosystem with quantum dots which is under the influence of an acoustic wave is constructed. The uniform deformation of the InAs/GaAs heterostructure with InAs quantum dots is calculated. The offered approach takes into account as a strain caused by a misfit of parameters of lattices of contacting materials as well as the influence of an acoustic wave on the intense state of a heterosystem with quantum dots.