

## РАЗДЕЛЕНИЕ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В СВЕРНУТЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

*В.М.Осадчий, В.Я.Принц*

*Институт физики полупроводников Сибирского отделения РАН  
630090 Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 22 мая 2000 г.

После переработки 10 августа 2000 г.

Проведены расчеты деформаций в свернутых InAs/GaAs гетероструктурах нанометровых размеров. Показано, что распределение деформаций существенно различается в нанотрубках (структурах с когерентно сросшимися витками) и наносвитках, что ведет к различию в энергетическом спектре носителей заряда. В нанотрубках возможно пространственное разделение фотогенерированных электронов и дырок по толщине стенки.

PACS: 73.20.Dx

Свойства двумерного электронного газа на цилиндрической поверхности, обусловленные чисто геометрическими факторами, теоретически исследовались в ряде работ [1–4]. Недавно был продемонстрирован метод создания микро- и нанотрубок и свитков [5, 6]. Для их изготовления использованы тонкие напряженные двуслойные пленки InGaAs/GaAs, выращенные на подложке из InP или GaAs. Из-за рассогласования постоянных решеток в составляющих слоях слой GaAs растянут, а слой InGaAs сжат. После освобождения такой двуслойной напряженной пленки от связи с подложкой пленка в результате упругой релаксации механических напряжений сворачивается в свиток. При этом в свитке происходит сращивание слоев, в результате чего формируется трубка с монокристаллическими стенками. В стенках сформированной трубки существуют значительные упругие деформации. Известно [7], что деформации влияют на зонную структуру полупроводников, а в квантово-размерных структурах их наличие существенным образом определяет энергетический спектр носителей заряда. В данной работе мы проводим в простой модели расчеты деформаций в стенках GaAs/InAs нанотрубки, а также энергетических уровней и волновых функций носителей заряда в этой структуре.

На рис.1 изображена исследуемая структура. Для упрощения приняты следующие приближения. Трубка считается аксиально симметричной, исходная пленка выращена на подложке (100), ось трубки ориентирована вдоль кристаллографического направления [010] – при этих условиях отличны от нуля только диагональные компоненты тензора деформации: в осевом направлении  $-\epsilon_z$ , в азимутальном  $-\epsilon_\theta$  и в радиальном  $-\epsilon_r$ . Приняты следующие значения параметров материалов: в GaAs постоянная решетки  $a = 0.5653$  нм, модуль Юнга  $E = 85.5$  ГПа, коэффициент Пуассона  $\nu = 0.31$ , в InAs:  $a = 0.6058$  нм,  $E = 51.4$  ГПа,  $\nu = 0.35$ . Расчеты проведены для 4-витковой трубки, сформированной из двуслойной пленки с толщинами слоев InAs и GaAs в 3 монослоя. Внутренний радиус трубки  $R$  определяется как радиус кривизны двуслойной пленки [8] и  $R = 16.5$  нм.

Для вычисления деформаций в слоях, образующих стенку трубки, найдем величины постоянных решеток слоев. Постоянная решетки  $a_z$  в направлении, параллельном оси трубки, не изменится при сворачивании трубки и будет равна постоянной

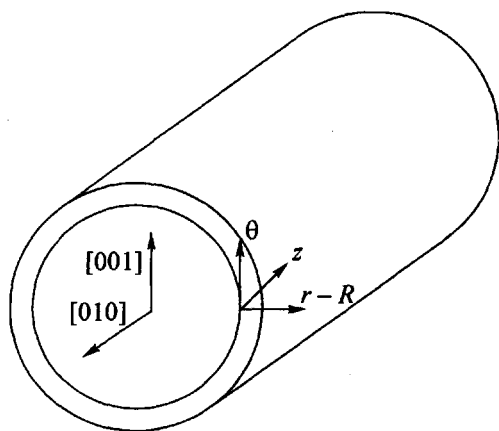


Рис.1. Схематическое изображение нанотрубки. Показаны кристаллографические направления и оси для вычисления компонент тензора деформации

решетки в плоскости свободной сверхрешетки [7]:

$$a_z = \frac{a_1 G_1 h_1 + a_2 G_2 h_2}{G_1 h_1 + G_2 h_2},$$

где  $h_1, h_2$  – толщины слоев,  $G_{1(2)} = E_{1(2)}/(1 - \nu_{1(2)})$ . Разница постоянной решетки в ненапряженном и напряженном материалах определяет деформацию  $\epsilon_z = (a - a_z)/a_z$  (рис.2а, кривая 1).

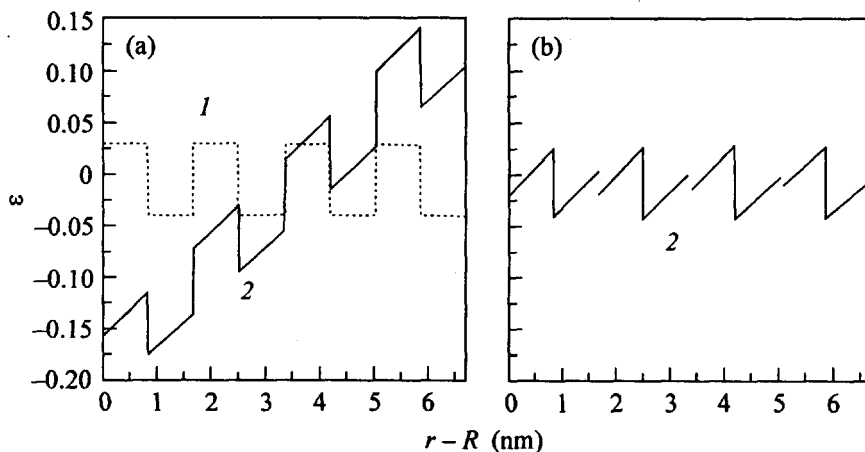


Рис.2. Распределение по толщине осевой (1) и азимутальной (2) деформаций в нанотрунке (а) и нановитке (б)

При изгибе однослойной пленки нейтральная поверхность (граница между сжатыми и растянутыми слоями) проходит почти посередине пленки [9]. В двухслойной пленке к деформации изгиба добавляется также деформация из-за несоответствия решеток на гетерогранице. При вычислении деформации в азимутальном направлении в многослойной трубке мы полагали, что нейтральная поверхность проходит посередине стенки трубки. На этой поверхности постоянная решетки  $a_\theta$  в азимутальном направлении равна величине постоянной решетки вдоль оси трубки  $a_z$ . Это следует из того, что энергия упругой деформации трубки, как показали наши расчеты,

близка к минимуму при  $a_\theta = a_z$ . Очевидно, что для монокристаллической трубки  $a_\theta$  линейно изменяется вдоль радиуса и легко определить отсюда зависимость деформации в азимутальном направлении от радиуса (рис.2а, кривая 2). Деформация в радиальном направлении находится из соотношения Пуассона  $\epsilon_r = -\nu(1-\nu)^{-1}(\epsilon_\theta + \epsilon_z)$ , которое выполняется даже для монослойных пленок [10].

Зная распределения деформаций, можно определить сдвиги краев зон [7]: зоны проводимости  $\Delta E_c = a_c \text{Tr}(\epsilon)$ , валентной зоны

$$\Delta E_{hh(th)} = a_v \text{Tr}(\epsilon) \mp b \left( \epsilon_r - \frac{\epsilon_\theta + \epsilon_z}{2} \right)$$

(верхний знак относится к зоне тяжелых дырок, нижний – к зоне легких дырок), где  $\text{Tr}(\epsilon) = \epsilon_r + \epsilon_\theta + \epsilon_z$ ,  $a_c$ ,  $a_v$ ,  $b$  – деформационные потенциалы. В GaAs величины  $a_c = -7.17$  эВ,  $a_v = 1.16$  эВ,  $b = -1.6$  эВ, в InAs  $a_c = -5.08$  эВ,  $a_v = 1$  эВ,  $b = -1.6$  эВ. Поскольку недиагональные компоненты тензора деформации равны нулю, то пьезоэлектрическое поле отсутствует [11]. Рассчитанные профили краев зон (проводимости и валентной для тяжелых дырок) по толщине трубки в нелегированной структуре приведены на рис.3а (сплошные линии). Здесь учтено, что в GaAs ширина запрещенной зоны  $E_g = 1.424$  эВ, электронное сродство  $\chi = 4.07$  эВ, в InAs

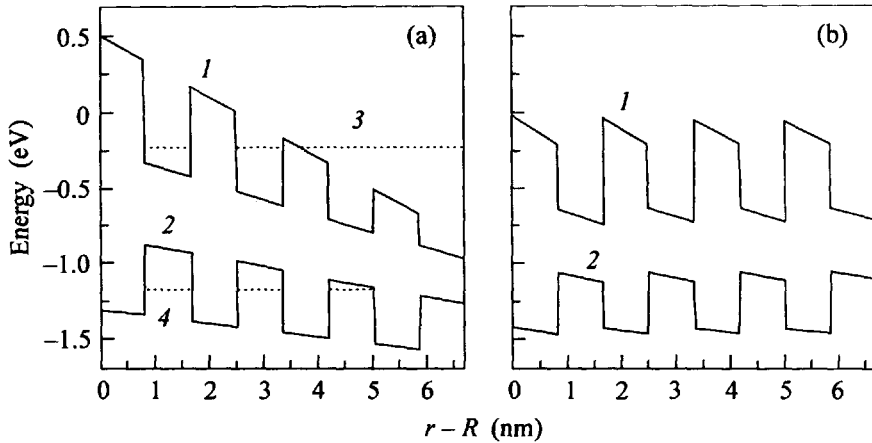


Рис.3. Ход краев зон проводимости (1) и валентной (2) в нанотрубке (а) и наносвитке (б). Электронный (3) и дырочный (4) уровни энергии в нанотрубке (а)

$E_g = 0.355$  эВ,  $\chi = 4.9$  эВ. Как видим, ширина запрещенной зоны изменяется скачком на границах слоев, в каждом слое ширина зоны уменьшается в направлении наружной стенки трубки, края обеих зон понижаются в направлении наружной стенки. Данная картина получена в приближении отсутствия приповерхностного изгиба зон и малости кулоновского взаимодействия между носителями заряда, что оправдано. Действительно, для нелегированных структур приповерхностный изгиб зон мал, кроме того, он может исчезать при низких температурах при фотогенерации носителей заряда [12], когда и можно наблюдать одновременное присутствие электронов и дырок. Кулоновское же взаимодействие между носителями заряда, образованными фотогенерацией, даже для случая очень большой плотности заряда электронов и дырок на противоположных поверхностях трубки  $10^{12} \text{ см}^{-2}$  при рассматриваемой

толщине стенки дает вклад в изменение потенциала, как легко оценить, лишь около 0.1 эВ, что значительно меньше вызванного деформацией.

Исходя из хода краев зон, вычисляем энергетический спектр и волновые функции носителей заряда в исследуемой структуре. Уравнение Шредингера в приближении эффективной массы для радиальной части волновой функции  $\Psi$  основного состояния (с равным нулю азимутальным числом) имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{d\Psi}{dr} \right) + U\Psi = E_0\Psi.$$

Здесь  $m^*$  – эффективная масса электрона или дырки,  $U$  – потенциальная энергия (край соответствующей зоны). Принималось, что в GaAs электронная масса  $m^* = 0.067m_0$ , в InAs  $m^* = 0.023m_0$ , где  $m_0$  – масса свободного электрона, дырочная масса для обоих материалов равна  $0.4m_0$ . Однозонное приближение эффективной массы дает правильные уровни для электронов и для основного состояния дырок [13]. Для возбужденных состояний дырок нужно учитывать перемешивание зон тяжелых и легких дырок, которое приводит, например, в квантовых проволоках к уменьшению эффективной дырочной массы на 30% при уменьшении радиуса проволоки с 10 нм до 2.5 нм [14]. Такие изменения массы не оказывают существенного влияния на полученные нами результаты. Граничными условиями для волновой функции являются обращение ее в нуль на стенках трубки и сохранение на гетерограницах величин  $\Psi$  и  $(1/m^*)(d\Psi/dr)$ .

В уравнении Шредингера для нашей структуры потенциальная энергия является кусочно-линейной функцией радиуса – в этом случае решение уравнения не выражается через известные функции и может быть получено только численными методами. На рис.3а пунктирными линиями обозначены рассчитанные энергетические уровни для электронов и дырок. Электронный уровень приведен для состояния в  $\Gamma$ -минимуме зоны проводимости. В боковых ( $L$  и  $X$ ) минимумах эффективная масса выше, чем в  $\Gamma$ -минимуме, и уровни размерного квантования в них поднимаются медленнее с уменьшением размеров ямы: однако расчеты показали, что все же низшим состоянием для трубок с толщиной InAs более одного монослоя является состояние электрона из  $\Gamma$ -долины, так же как и для свободных сверхрешеток GaAs/InAs [15].

На рис.4 изображены рассчитанные волновые функции электронов и дырок. Видим заметное пространственное разделение носителей заряда противоположного знака, что можно было ожидать из хода краев зон (рис.3а). Как показали расчеты, разделение зарядов имеет место для числа витков, большего 2, и степень разделения заряда возрастает с увеличением числа витков.

Для сравнения рассмотрим распределение деформаций и хода краев зон в наносвитке – свернутой гетероструктуре, в которой витки не сращены. В этом случае нейтральная поверхность в каждом витке находится посередине витка и на ней постоянная решетки в азимутальном направлении  $a_\theta$  равна постоянной вдоль оси  $a_z$ ,  $a_\theta$  изменяется линейно по толщине пленки. Распределение азимутальной деформации приведено на рис.2b. Видим существенное отличие от распределения деформации в трубке. В свитке деформация в каждом витке определяется в основном его радиусом, в трубке напряжения существуют на всех гетерограницах и деформации в витках не являются независимыми. Деформация вдоль оси одинакова в трубке и свитке.

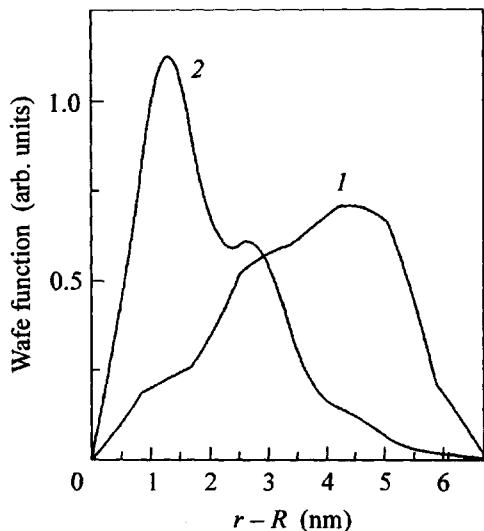


Рис.4. Волновые функции электронов (1) и дырок (2) в нанотрубке

Ход краев зон в свитке показан на рис.3б. Видно слабое его изменение от витка к витку. Минимум края зоны проводимости в каждом витке приходится на правую границу слоя InAs. Легко показать, что в этой точке часть сдвига зоны проводимости, зависящая от радиуса витка  $R_s$ , равна

$$a_c \frac{1 - 2\nu}{1 - \nu} \frac{a_z}{a_{\text{InAs}}} \frac{h_{\text{InAs}}}{R_s},$$

то есть минимум края зоны проводимости (потенциальной ямы для электронов) слегка поднимается при переходе к внешним виткам. Максимум края валентной зоны не изменяется при переходе от витка к витку. Расчеты показали, что в свитке заметного разделения носителей заряда по знаку нет.

Кратко остановимся на рассмотрении вопроса о максимальной величине деформации, достигаемой в стенках трубки (рис.2а). Как видно из рисунка, максимальная деформация в 4-витковой трубке значительно превышает деформацию, достигаемую в псевдоморфных слоях, полученных методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Пленки GaAs и InAs толщиной в 4 монослоя могут быть выращены на InP подложке, и достигаемая при этом деформация  $\approx 4\%$ . На рис.2а два бислоя посредине стенки трубки имеют деформацию в этих пределах. В наружных же слоях деформация превышает 10%-ную величину термодинамического предела несоответствия решеток для псевдоморфного роста пленок [16]. Такие деформации должны бы привести к возникновению дислокаций, однако при низких температурах роста, типичных для МЛЭ, возможно существование метастабильного псевдоморфного состояния. Так, получены псевдоморфные монослои CdTe на GaAs подложке с несоответствием решеток 14% [17] и монослои  $\text{Si}_{0.48}\text{C}_{0.52}$  в кремнии с деформациями выше 10% [18]. В нашем же случае мы имеем готовые исходные псевдоморфные пленки, а процесс сворачивания пленок в трубку производится при комнатной температуре, при этом дислокации не вводятся, что подтверждается электронно-микроскопическими исследованиями подобной трубки [6].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты # 00-02-16764, # 99-02-16689) и Российской программы "Физика твердотельных наноструктур" (проект # 98-2030).

---

1. Л.И.Магарилл, Д.А.Романов, А.В.Чаплик, Письма в ЖЭТФ **64**, 421 (1996).
2. Л.И.Магарилл, Д.А.Романов, А.В.Чаплик, ЖЭТФ **113**, 1411 (1998).
3. Л.И.Магарилл, А.В.Чаплик, ЖЭТФ **115**, 1478 (1999).
4. А.И.Веретенников, А.В.Чаплик, ЖЭТФ **117**, 449 (2000).
5. V.Ya.Prinz, V.A.Seleznev, and A.K.Gutakovsky, *Proc. ICPS-24 (Jerusalem 1998)*, Singapore: World Scientific, 1999.
6. V.Ya.Prinz, V.A.Seleznev, A.K.Gutakovsky et al., *Physica* **E6**, 828 (2000).
7. C.G.Van de Walle, *Phys.Rev.* **B39**, 1871 (1989).
8. Y.C.Tsui and T.W.Clyne, *Thin Solid Films* **306**, 23 (1997).
9. S.Timoshenko and S.Woinowsky-Krieger, *Theory of plates and shells*, New York: McGraw-Hill Book, 1959. (С.П.Тимошенко, С.Войновский-Кригер, *Пластинки и оболочки*, М.: Физматгиз, 1963).
10. J.E.Bernard and A.Zunger, *Appl.Phys.Lett.* **65**, 165 (1994).
11. J.F.Nye, *Physical properties of crystals*, New York: Oxford University Press, 1985.
12. R.B.Darling, *Phys. Rev.* **B43**, 4071 (1991).
13. H.Jiang and J.Singh, *Phys. Rev.* **B56**, 4696 (1997).
14. P.C.Sercel and K.J.Vahala, *Phys. Rev.* **B42**, 3690 (1990).
15. A.Taguchi and T.Ohno, *Phys. Rev.* **B38**, 2038 (1988).
16. I.Daruka and A.L.Barabasi, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3708 (1997).
17. H.Sitter and W.Faschinger, *Thin Solid Films* **225**, 250 (1993).
18. W.Faschinger, S.Zerlauth, J.Stangl, and G.Bauer, *Appl. Phys. Lett.* **67**, 2630 (1995).