

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

на правах рукописи

**Косарев Александр Николаевич**

**Электронно-дырочные пары, локализованные в системах квантовых точек  
InGaAs**

1.3.8 - физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

Доктор физико-математических наук

Чалдышев Владимир Викторович

Санкт-Петербург - 2023

Введение .....	4
Глава 1. Обзор литературы .....	12
Появление эпитаксиальных квантовых точек, их преимущества и применения. ...	13
Методы производства наноструктур .....	17
Квантовые точки и локализованные в них носители заряда .....	19
Гибридные экситон-плазмонные структуры .....	21
Глава 2. Особенности локализации носителей в само-организованных квантовых точках InGaAs.....	24
Методы.....	26
2.1 Локализация носителей заряда в самоорганизованной квантовой точке: взаимодействие вкладов квантовой и упругой механик в энергию локализованных носителей заряда.....	30
Введение .....	30
Изучаемая структура.....	31
Результаты и обсуждение результатов .....	31
Заключение.....	37
2.2 Локализация носителей в структуре квантовая точка в квантовой яме. ....	38
Введение .....	38
Исследуемая модель.....	39
Результаты и обсуждение результатов .....	40
Заключение.....	48
2.3 Экспериментально-верифицированное моделирование квантовой точки системы InGaAs .....	50
Введение .....	50
Материалы и методы .....	51
Полученные результаты .....	54
Обсуждение .....	57
Заключение.....	61
Глава 3. Управление люминесцентными свойствами КТ InAs с помощью плазмонных частиц.....	63
3.1 Фотолюминесценция из квантовых точек InAs в GaAs, заращенных слоем GaAs при пониженной температуре .....	64
Введение .....	64
Образцы.....	65

Экспериментальные методы .....	66
Результаты .....	67
Обсуждение результатов.....	71
Заключение.....	78
3.2 Квантовые точки InGaAs в ближнем поле серебряных наночастиц .....	79
Введение .....	79
Образцы.....	80
Экспериментальные методы .....	80
Результаты измерений.....	81
Заключение.....	86
Заключение.....	87
Список литературы .....	90

## Введение

### Актуальность темы

Квантовые точки (КТ) обладают способностью локализовать носители заряда во всех трех направлениях, и, за эту способность, их иногда называют «искусственными атомами» [Alferov, 2001; Ashooghi, 1996]. Высококачественные КТ могут быть получены путем самоорганизации в рамках широко распространенных технологических методов молекулярно-лучевой (МЛЭ) или газофазной эпитаксии (ГФЭ). Такие методы разработаны для создания КТ в самых разных системах материалов, включая InAs-GaAs-InP-GaSb [Sautter, 2020], Ge-Si [Brunner, 2002], InN-GaN-AlN [Adelmann, 2000] и т. д. За счёт хорошо отработанного процесса производства и совместимости технологий самоорганизации КТ с другими технологиями роста полупроводников, КТ могут быть использованы во многих электронных, оптических и оптоэлектронных приборах, таких как лазеры, солнечные элементы или одноэлектронные запоминающие устройства [Bayer, 2019; Sautter, 2020].

Наиболее распространены КТ на основе InGaAs, сформированные на поверхности GaAs, а затем выращенные слоем этого материала или более широкозонным AlGaAs. Лазеры с такими КТ в активной области демонстрируют низкие пороговые токи и высокую температурную стабильность [Arakawa, 1982], а также большую энергоэффективность и быстродействие. В электронике такие КТ могут быть использованы для хранения информации путем пространственной локализации одиночных электронов или дырок. Локализованные в КТ носители заряда могут достаточно долго сохранять спиновую когерентность [Kosarev, 2022]. Важным свойством КТ является излучение одиночных фотонов при рекомбинации электрон-дырочной пары. Основанные на КТ источники света создают поток фотонов со специфической статистикой, требуемой для различных задач квантовых технологий [Eisaman, 2011], включая квантовое шифрование [Ekert, 1991] и генерацию случайных чисел, а также для метрологии и измерений за пределами дробового шума [Motes, 2015].

Интенсивные исследования КТ привели к значительному прогрессу в технологии их формирования и пониманию физики происходящих в них процессов. Тем не менее количество посвященных КТ публикаций в ведущих международных научных журналах остается очень высоким, что показывает существование открытых вопросов в физике и технологиях производства КТ, требующих дальнейшего углубленного исследования. Одной из важнейших научных задач, связанных с КТ, является выяснение факторов, влияющих на локализацию носителей заряда в них, и изучение возможностей управления

этим явлением. Другой важнейшей задачей является управление временем жизни носителей заряда и экситонных возбуждений, локализованных в КТ.

Глубина локализации носителей в КТ является определяющей для длины волны их излучения, а также для противодействия тепловому выбросу носителей из КТ. Энергия электрона и дырок в КТ сильно отличается от их энергии в объемном материале, из которого сделана КТ, в первую очередь за счёт существенной деформации, а также за счёт размерного квантования. Углубление локализации носителей позволит добиться смещения частот оптических резонансов в сторону длинных волн. Это важно, например, для использования КТ InGaAs в приборах оптоволоконных линий связи в полосе длин волн 1.55 мкм.

Несмотря на то, что КТ является хорошим источником фотонов с квантовым выходом близким к единице, дипольный момент КТ, определяющий их взаимодействие со светом, не слишком велик. Время излучательной рекомбинации экситонов, локализованных в КТ, велико и может достигать 1 нс [Salewski, 2017], что является лимитирующим фактором для использования КТ в качестве эффективного источника фотонов.

Усиление интенсивности излучения из КТ может быть обеспечено за счёт её помещения в резонаторы, усиливающие электрическое поле, и, вместе с тем, увеличивающие плотность фотонных состояний. Наиболее популярным вариантом является планарный резонатор, который технологически хорошо совместим с процессами роста КТ и может быть произведён в рамках единого технологического процесса МЛЭ либо ГФЭ. Такой же эффект может быть достигнут путем помещения КТ в двух или трёхмерные периодические структуры, в пучность галереи шепчущих мод, либо путем формирования резонаторов Ми [Vahala, 2003].

Альтернативным подходом является использование плазмонного резонанса в металлических наночастицах, который может концентрировать электрическое поле в области локализации экситона. Такой подход был продемонстрирован для коллоидных КТ [Govorov, 2006], но мало изучался в системах эпитаксиальных КТ [Lyamkina, 2014].

Таким образом, несмотря на появление приборов на основе КТ, существует ряд проблем, решение которых позволит улучшить существующие приборы на их основе и откроет путь для создания новых. Одними из наиболее важных направлений исследований являются изучение физических механизмов и способов управления глубиной локализацией и временем жизни носителей заряда, локализованных в КТ. Модельным и практически важным объектом

исследования являются самоорганизованные КТ InGaAs, окруженные барьерным слоем GaAs.

## Цели работы

Исходя из вышесказанного были сформулированы две цели, достижению которых посвящены вторая и третья главы, соответственно:

- изучение механизмов, ограничивающих глубину локализации носителей в КТ InGaAs, самоорганизованных на подложках GaAs и зарощенных в объеме этого материала, а также изучение возможностей усиления локализации за счет изменения размера, формы и окружения таких КТ.
- изучение возможностей управления временем жизни носителей заряда в КТ InGaAs путем создания гибридных структур, в которых КТ InGaAs расположены в непосредственной близости от системы металлических наночастиц.

Для достижения целей были решены следующие задачи:

- Задача теории упругости для определения локальных значений тензора деформации и тензора напряжений в самоорганизованных КТ InGaAs, сформированных на подложках GaAs и окруженных барьерным слоем.
- Создание численной модели электронов и дырок в КТ с локализуемым потенциалом учитывающим пространственное распределение In и упругих деформаций.
- Изучение влияния формы пирамидальной КТ на глубину локализации носителей заряда.
- Анализ механизмов, увеличивающих локализацию носителей в структурах типа точка в яме (dot in a well -- DWELL), в которых КТ InAs помещена в квантовую яму InGaAs.
- Создание модели КТ InGaAs на основе экспериментально-определенных формы, размера и пространственного распределения химического состава. Верификация такой модели путем сравнения результатов модельных расчетов с результатами экспериментальных исследований спектров фотолюминесценции из этих КТ.
- Исследование изменения оптических свойств КТ InGaAs в матрице GaAs при зарощивании её слоем GaAs, выращенным при пониженной температуре, в котором формируется система плазмонных наночастиц As.

- Исследование изменения оптических свойств КТ InGaAs в матрице AlGaAs при формировании массива плазмонных наночастиц Ag на поверхности в непосредственной близости от КТ.

### **Научная новизна**

1. Впервые показано, что для самоорганизованной пирамидальной КТ InAs существует оптимальное отношение высоты пирамиды к ее основанию, обеспечивающее наибольшую глубину локализации носителей заряда и наиболее сильный красный сдвиг излучения экситонов из КТ.
2. Впервые показано, что усиление локализации носителей заряда в DWELL InGaAs происходит в результате совместного действия *трех* механизмов. Этими механизмами являются увеличение объема КТ, изменение ее формы и перераспределение компонент тензора деформаций. Получены предельные параметры локализации носителей заряда в таких DWELL, при которых обеспечивается когерентность эпитаксиальных интерфейсов.
3. Впервые проведено моделирование КТ InGaAs для которой, размер, форма и пространственное распределение индия определены экспериментально с высоким разрешением. Продемонстрировано хорошее согласие результатов расчета с экспериментальными спектрами фотолюминесценции из таких КТ. Показано, что основное состояние дырок в такой КТ имеет необычную пространственную симметрию.
4. Впервые проведены исследования оптических свойств гибридных структур, в которых КТ InGaAs отделены туннельно-тонким барьером от эпитаксиального слоя нестехиометрического GaAs, содержащего плазмонные наночастицы As.
5. Впервые проведены исследования оптических свойств гибридных структур, в которых КТ InGaAs находятся вблизи поверхности, на которой сформирован слой плазмонных наночастиц Ag.

### **Практическая значимость**

Квантовые точки InGaAs, получаемые с помощью самоорганизации по механизму Странского-Крастанова методом МЛЭ, являются важной составной частью современных электронных, оптоэлектронных и фотонных приборов, как выпускаемых промышленностью, так и находящихся на стадии разработки. Результаты исследований, приведенные в диссертации, показывают возможности управления электронной структурой и свойствами КТ InGaAs. Возможности управления глубиной локализации носителей и их временем жизни в КТ имеют ключевое значение как для совершенствования существующих приборов, так и для разработки новых.

## Методы исследования

Экспериментальные исследования стационарной фотолюминесценции и других оптических свойств были проведены при помощи стандартных современных методик на оптических установках при комнатной температуре, температуре жидкого азота либо жидкого гелия. Измерения спектров фотолюминесценции с временным разрешением проводились при помощи стрик-камеры.

Задачи линейной теории упругости и квантовой механики были решены численно, методом конечных разностей с использованием наиболее надежно установленных параметров материалов.

## Положения, выносимые на защиту

1. В пирамидальных квантовых точках зависимость глубины локализации носителей заряда от отношения высоты к основанию имеет экстремум, обусловленный влиянием на локализирующий потенциал гидростатической, девиаторной и сдвиговой компоненты тензора упругой деформации, а также эффектом размерного квантования. В системе пирамидальных квантовых точек InAs в GaAs минимальная энергия электронно-дырочных пар достигается при отношении высоты к основанию  $\approx 0.2$ .
2. Квантовые точки InAs, помещённые в квантовую яму InGaAs, обладают большей глубиной локализации носителей по сравнению с аналогичными квантовыми точками в объеме GaAs благодаря совместному действию *трёх* механизмов: увеличению объема квантовой точки, перераспределению упругих деформаций, и изменению отношения длины основания пирамидальной квантовой точки к её высоте. Требование когерентности интерфейсов ограничивает предельную глубину локализации.
3. В гибридных структурах, содержащих квантовые точки InGaAs и металлические наночастицы, время жизни локализованных в квантовой точке электронов и дырок определяется структурой разделительного барьера и разностью потенциалов между элементами структуры. В структурах с разделительным барьером GaAs толщиной около 5 нм основным механизмом передачи энергии между квантовыми точками и наночастицами является туннелирование.



## **Достоверность**

Экспериментальные результаты, представленные в работе, были получены с помощью современных методик и оборудования. Результаты исследований обладают воспроизводимостью. Сравнение с литературными данными других авторов показало хорошее согласие. Анализ экспериментальных данных проведен на основе численного моделирования с учетом реальной структуры и параметров материалов. Результаты модельных расчетов электронной структуры основного состояния КТ InGaAs сравнивались как с экспериментальными данными, так и с расчетными данными других авторов. Во всех случаях установлено хорошее качественное и количественное согласие. Для разработки моделей использовались данные об атомной структуре самих КТ и микроструктуре содержащих их образцов.

## **Апробация работы**

Основные результаты работы были доложены на 26 российских и международных конференциях:

ФизикаА (Санкт-Петербург, 2015); Симпозиум “Наука и инновации в технических университетах” (Санкт-Петербург, 2015); Неделя науки СПбПУ (Санкт-Петербург, 2015); XX симпозиум «Нанофизика и наноэлектроника» (Нижний Новгород, 2016); Materials Research Society Fall Meeting (Boston, Massachusetts, USA, 2016); 4th International Symposium «Optics & its Applications» (Yerevan-Ashtarak, Armenia, 2016); ФизикаА (Санкт-Петербург, 2016); 3th International School and Conference "Saint-Petersburg OPEN 2016" (Санкт-Петербург, 2016); Неделя науки СПбПУ (Санкт-Петербург, 2016); Международная зимняя школа по физике полупроводников (Санкт-Петербург, 2017); 4th International School and Conference "Saint-Petersburg OPEN 2017" (Санкт-Петербург, 2017); XIII Российская конференция по физике полупроводников (Екатеринбург, 2017); Всероссийский форум студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука и инновации в технических университетах» (Санкт-Петербург, 2017); Неделя науки СПбПУ (Санкт-Петербург, 2017); Зимняя школа по физике полупроводников (Санкт-Петербург, 2017); The 38<sup>th</sup> PIERS in St Petersburg (Санкт-Петербург, 2017); MRS Fall Meeting & Exhibit (Boston, Massachusetts, USA, 2017); SPIE Photonics West (San-Francisco, USA, 2018); Nonlinear Optics and Excitation Kinetics in Semiconductors – NOEKS 14 (Berlin, Germany, 2018); Фундаментальные проблемы оптики (Санкт-Петербург, 2018); Наука и инновации в технических университетах (Санкт-Петербург, 2018); Неделя науки СПбПУ (Санкт-Петербург, 2018); Deutsche Physikalische Gesellschaft 2019 (Regensburg, Germany, 2019); The 11th International Conference on Quantum Dots (Munich, Germany, 2020); Симпозиум «Нанофизика и наноэлектроника» (Нижний

Новгород, 2021); Низкоразмерный семинар, ФТИ им. А.Ф.Иоффе (Санкт-Петербург, 2021).

### **Личный вклад автора**

Вклад соискателя в экспериментальную часть работы состоял в проведении оптических измерений, дизайне и сборке соответствующих оптических установок и анализе полученных данных. Разработка математических модели для проведения численного эксперимента проводилась автором самостоятельно с использованием наработок коллег. Постановка задач и интерпретация полученных данных проводилась совместно с научным руководителем.

### **Публикации автора по теме диссертации**

Основные результаты работы изложены в 10 статьях, опубликованных в научных изданиях, индексируемых Scopus, Web of Science и РИНЦ.

- A1. Experimentally-Verified Modeling of InGaAs Quantum Dots / A. Kosarev, V. V. Chaldyshev, N. Cherkashin //Nanomaterials. – 2022. – Т. 12. – №. 12. – С. 1967. DOI: 10.3390/nano12121967
- A2. Carrier Localization by a Quantum Dot in a Quantum Well / A.N. Kosarev, V.V. Chaldyshev //Physical Review Applied. – 2021. – Т. 16. – №. 4. – С. 044046. DOI: 10.1103/PhysRevApplied.16.044046
- A3. Charge carrier localization in InAs self-organized quantum dots /A. N. Kosarev, V.V. Chaldyshev //Pisma v Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki. – 2021. – Т. 47. – №. 23. – С. 51-54. DOI: 10.21883/PJTF.2021.23.51786.19006
- A4. Carrier localization in self-organized quantum dots: An interplay between quantum and solid mechanics / A. Kosarev, V.V. Chaldyshev//Applied Physics Letters. – 2020. – Т. 117. – №. 20. – С. 202103. DOI: 10.1063/5.0032110
- A5. Accurate photon echo timing by optical freezing of exciton dephasing and rephasing in quantum dots / A.N. Kosarev, H. Rose, S.V. Poltavtsev, M. Reichelt, C. Schneider, M. Kamp, S. Höfling, M. Bayer, T. Meier & I. A. Akimov //Communications Physics. – 2020. – Т. 3. – №. 1. – С. 1-9. DOI: 10.1038/s42005-020-00491-2
- A6. Photoluminescence from InAs Quantum Dots Buried Under Low-Temperature-Grown GaAs /A. Kosarev, N. Bert, V. Nevedomskii, V. Chaldyshev, V. Preobrazhenskii, M. Putyato, B. Semyagin //Physica Status Solidi (b). – 2019. – Т. 256. – №. 5. – С. 1800479. DOI: 10.1002/pssb.201800479

- A7. Fabrication and characterization of coupled ensembles of epitaxial quantum dots and metal nanoparticles supporting localized surface plasmons /A. Kosarev, V. Chaldyshev, N. Toropov, I. Gladskikh, P. Gladskikh, K. Baryshnikova, V. Preobrazhenskiy, M. Putyato, B. Semyagin, T. Vartanyan //Plasmonics: Design, Materials, Fabrication, Characterization, and Applications XV. – SPIE, 2017. – Т. 10346. – С. 48-53. DOI: 10.1117/12.2272994
- A8. Absorption and photoluminescence of epitaxial quantum dots in the near field of silver nanostructures/ N. A. Toropov, I. A. Gladskikh, P. V. Gladskikh, A. N. Kosarev, V. V. Preobrazhenskii, M. A. Putyato, B. R. Semyagin, V. V. Chaldyshev, and T. A. Vartanyan //Journal of Optical Technology. – 2017. – Т. 84. – №. 7. – С. 459-461. DOI: 10.1364/JOT.84.000459
- A9. Effect of silver nanoparticles on excitons in InAs epitaxial quantum dots/ Toropov N.A., Gladskikh P.V., Gladskikh I.A., Preobrazhenskiy V.V., Putyato M.A., Semyagin B.R., Kosarev A., Kondikov A.A., Chaldyshev V.V., Vartanyan T.A. //Журнал прикладной спектроскопии. – 2016. – Т. 83. – №. 6-16. – С. 170-171.
- A10. Effect of a low-temperature-grown GaAs layer on InAs quantum-dot photoluminescence / A.N. Kosarev, V. V. Chaldyshev, V. V. Preobrazhenskii, M. A. Putyato & B. R. Semyagin //Semiconductors. – 2016. – Т. 50. – №. 11. – С. 1499-1505. DOI: 10.1134/S1063782616110154

### **Объем и структура работы**

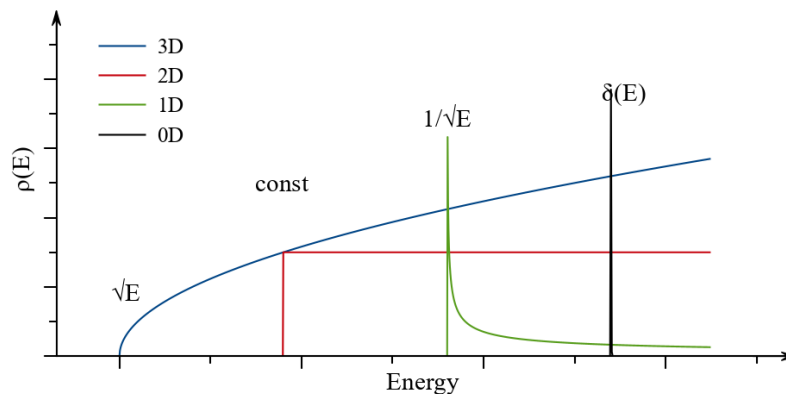
Работа состоит из введения, трёх глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 98 страниц, она содержит 35 рисунков и одну таблицу. В списке литературы 122 наименований.

## Глава 1. Обзор литературы

Полупроводниковые материалы были известны задолго до взлёта полупроводниковой индустрии, ставшей важнейшей частью современного мира. Поворотным моментом, обеспечившим такой рост популярности этой области стал транзистор, который обладал малыми размерами и позволил строить компактную энергоэффективную электронику без использования электронных ламп. Отдельным плюсом такого подхода стала возможность миниатюризации и интеграция электронных компонентов. В таком случае элемент электрической схемы, аналогичный электронной лампе, может быть сделан на основе полупроводника с линейным размером порядка десятков нанометров.

Так как первые полупроводниковые приборы были разработаны на основе Si и Ge, изучение и технологии производства этих материалов на настоящий момент находятся на очень высоком уровне. Таким образом, современная электроника и микроэлектроника в основном базируется на кремниевых микрочипах. Эти технологии хорошо отработаны, отчасти за счёт вовлечения большого бизнеса. Тем не менее, из-за того, что кремний – не прямозонный полупроводник, его применение в оптоэлектронике ограничено.

GaAs и InAs являются прямозонными, поэтому их оптическая активность существенно выше, чем у Si, но они значительно уступают Si по популярности и, следовательно, по отлаженности технологий массового производства. Несмотря на текущее положение дел, эти материалы обладают большой перспективой не только в оптоэлектронике, но и в микроэлектронике за счёт большей подвижности зарядов и, следовательно, больших максимальных частот работы. Таким образом, для применения полупроводников в оптоэлектронике предпочтительны прямозонные материалы группы  $A_3B_5$ , в частности, упомянутые выше GaAs и InAs, о которых дальше пойдет речь.



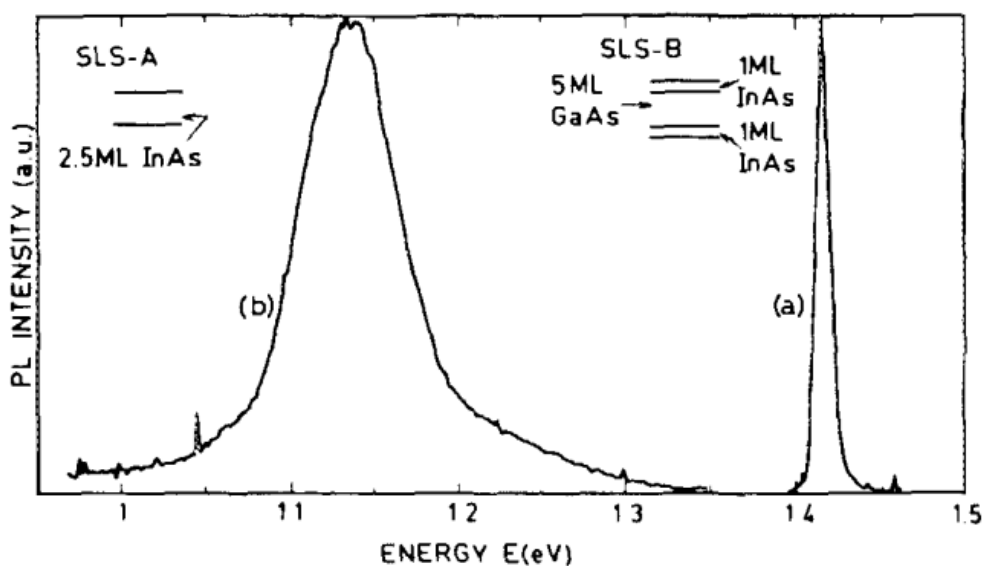
**Рис. 1.1.** Энергетическая зависимость плотности состояний в структурах различной размерности.

Использование полупроводниковых наноструктур имеет множество преимуществ относительно объемного материала. Варьируя состав твёрдых растворов материалов с разными ширинами запрещённой зоны, есть возможность создавать профили потенциала для электронов и дырок практически произвольным образом. Уменьшение размеров по, как минимум, одному из направлений до порядка десятка нанометров приводит к размерному квантованию. В такой ситуации движение электрона ограничивается в этом направлении, а такие структуры называются *структурами пониженной размерности*. Хорошим примером таких структур является квантовая яма (КЯ), она состоит из тонкого слоя узкозонного полупроводника, окруженного широкозонным. Носители заряда, находящиеся внутри КЯ, могут двигаться только в двух направлениях плоскости ямы, и поэтому структура называется двумерной. Одним из главных преимуществ понижения размерности является увеличение плотности состояний на краях зон. На рис. 1.1 показаны плотности состояний краёв зоны для структур разных размерностей, смещение между ними символизирует вклад размерного квантования в минимальную энергию уровней. Для объемного материала зависимость плотности состояний от энергии носителя имеет вид  $\rho^{3D}(E) \propto \sqrt{E - E_g}$ . В окрестности края зоны плотность практически равна нулю. В то время как уже в КЯ эта плотность постоянна при любых энергиях  $\rho^{2D}(E) \propto const$ , что значительно увеличивает количество носителей с энергиями близкими к краю зоны. Именно за счёт высокой плотности состояний на краю зоны, излучатели на основе КЯ получили такую высокую эффективность. В случае структур более низких размерностей плотность состояний вблизи края зоны ещё выше, а именно имеет форму  $\rho^{1D}(E) \propto 1/\sqrt{E - E_g}$  и  $\rho^{0D}(E) \propto \delta(E - E_g)$ . Здесь плотность состояний стремится к бесконечности. Более подробно мы обсудим КТ в следующем разделе.

### Появление эпитаксиальных квантовых точек, их преимущества и применения.

Первый всплеск внимания к КТ, выращенным методами МЛЭ, произошел после работы Аракавы и Сакаки, опубликованной в 1982г. [Arakawa, 1982]. В этой работе авторы рассматривали снижение пороговых токов в полупроводниковых лазерах при переходе от объемного материала к структурам пониженной размерности. Было показано, что пороговые токи в лазерах, основанных на КТ, не должны зависеть от температуры, что было вскоре продемонстрировано экспериментально. Следует отметить, что это было сделано не на привычных в настоящее время КТ, сделанных различными методами самоорганизации, а при помощи травления поверхности КЯ, разделяя её плоскость на отдельные островки, чья форма определялась литографической маской.

Настоящий прорыв произошел после того, как набрала популярность технология самоорганизации КТ, впервые опубликованная в работе [Goldstein, 1985]. На рис. 1.2 показана фотолюминесценция (ФЛ) впервые выращенных самоорганизованных КТ, для сравнения справа изображена ФЛ из КЯ.



**Рис. 1.2.** На рисунке показана фотолюминесценция из образца, содержащего (a) КТ; (b) КЯ. [Goldstein, 1985]

Используя технологии тех лет, можно было выращивать массивы КТ практически без дефектов, благодаря чему квантовый выход был достаточно высок. В течение следующего десятилетия технологии производства и свойства таких КТ активно изучались, что позволило воспроизводимо выращивать КТ необходимой формы. Улучшение качества производства привело к сужению спектральной линии благодаря большим временам жизни локализованных в них неравновесных носителей и уменьшению разброса размеров КТ в ансамбле.

Самоорганизованные КТ были значительно проще в производстве, чем полученные при помощи на литографии и травления, и были использованы для создания лазеров. Более низкие токи сделали их более энергоэффективными и увеличили скорость переключения. В настоящее время такие лазеры производятся несколькими компаниями<sup>1</sup>. Благодаря широкому оптическому спектру ансамбля самоорганизованных КТ, на их основе можно также производить так называемые comb лазеры, которые в пределах одного

<sup>1</sup> Можно увидеть на сайтах [qdlaser.com](http://qdlaser.com) и [innolume.com](http://innolume.com).

резонатора генерируют одновременно от нескольких единиц до нескольких десятков эквидистантных спектральных линий, имеющих одинаковые пространственные моды. Такого эффекта можно также добиться объединением лучей соответствующего количества независимых лазеров, но такое решение затруднительно, более дорого и громоздко.

Другим перспективным применением КТ является излучение единичных фотонов. Благодаря тому, что фотон излучается при рекомбинации электрон-дырочной пары, мы можем быть уверены, что в один момент времени из КТ может быть излучен только один фотон. Такие источники создают поток света со специфической статистикой фотонов благодаря эффекту антибанчинга или некоррелированности излучения фотонов. Свет с такой статистикой требуется для множества задач квантовых технологий [Eisaman, 2011], включая вопросы шифрования [Ekert, 1992] и генерации случайных чисел, а также для метрологии и измерений за пределами дробового шума [Motes, 2015].

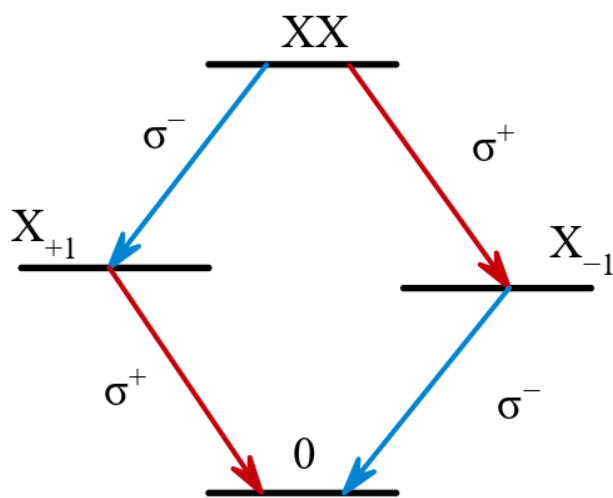
Также КТ могут быть использованы в качестве разнообразных детекторов. В частности, на основе КТ могут быть построены детекторы одиночных фотонов [Hadfield, 2009], обладающие достаточно низкими темновыми токами [Li, 2007]. При этом из-за значительной глубины локализации электронов и дырок такие фотодетекторы будут обладать большим преимуществом относительно аналогичных приборов на основе КЯ [Lim, 2007], к примеру, обеспечивая возможность работать при повышенных температурах.

Примерно в 2000-х появились исследования посвященные использованию КТ для фотогальванических задач. Эти исследования были мотивированы идеей использования переходов носителей между валентной зоной объемного материала и уровнями, локализованными в зоне проводимости КТ и наоборот для поглощения фотонов с низкой энергией, иначе теряемых в солнечных элементах впустую [Luque, 1997; Aroutiounian, 2001].

Генерация запутанных фотонов является важным элементом, необходимым для развития квантовых телекоммуникационных технологий [Gisin, 2007]. Согласно квантовой механике, пара квантово-запутанных фотонов демонстрирует суперпозицию всех состояний поляризации и может быть описана одной волновой функцией. Эти запутанные фотоны обладают интересными свойствами: даже если их разделяет какое-то сколь угодно большое расстояние, их поляризации остаются физически связанными. Измерение поляризации одного фотона мгновенно приводит к тому, что его партнёр принимает противоположную поляризацию. Запутанные фотоны необходимы для различных технологий квантовой связи [Shields, 2010]. Известны различные способы создания запутанных фотонов, включая нелинейные оптические

эффекты, отдельные атомы или атомные ансамбли, а также дефекты в алмазах [Kwiat, 1995]. Однако, генерация запутанных пар фотонов в полупроводниковых КТ имеет ряд явных преимуществ. КТ имеют малые размеры, могут быть выращены для работы в необходимом оптическом диапазоне, а также могут контролироваться электрическим полем [Yuan, 2002].

Можно использовать КТ для генерации запутанных фотонов посредством биэкситон-экситонного каскада, когда два электрона и две дырки внутри КТ образуют связанное биэкситонное состояние. При рекомбинации в основное состояние испускается два фотона, но эти два фотона оказываются ортогонально поляризованы. Если мы не знаем по какому из двух возможных каналов рекомбинации прошёл процесс излучения, то фотоны окажутся запутанными. Промежуточные уровни распада биэкситона – экситоны обладают разными полными проекциями углового момента. Если их расщепление меньше однородной ширины линии, то фотоны оказываются неразличимы по энергии и связаны. Несмотря на сложности, связанные с пьезоэлектрическим эффектом и сильной анизотропией структуры КТ, подходящие структуры на их основе могут быть получены. В настоящее время существуют прототипы светодиодов, излучающих пары запутанных фотонов [Stevenson, 2006; Hafenbrak, 2007].



**Рис. 1.3.** Энергетическая схема биэкситона и два канала его распада через экситон с проекцией углового момента  $+1$  и  $-1$ .

КТ имеет большие перспективы применения для когерентной оптики, в частности, для когерентных манипуляций с локализованными в них экситонами и комплексами на их основе. Это обусловлено рядом преимуществ, к примеру, локализация экситонов внутри КТ значительно увеличивает критически важный параметр  $T_2$  – время затухания оптической когерентности,



достигающий в КТ порядка 0.5 нс, в то время как в аналогичных КЯ, этот параметр более чем на порядок меньше. При достаточной глубине локализации, локализованный в КТ экситон изолирован от рассеяния на других носителях, либо смены места локализации, разрушающих оптическую когерентность.

Дефазировка, вызванная возбуждением (excitation induced dephasing), практически не наблюдается в ансамблях КТ благодаря тому, что количество экситонов, созданных в КТ, ограничивается числом КТ, а расстояние между ними гарантирует отсутствие экситон-экситонного взаимодействия. Таким образом,  $T_2$  может оставаться практически неизменным даже при достаточно сильных интенсивностях резонансного возбуждения [A5].

Легированием можно добиться того, что в стационарном состоянии квантовые точки будут заселены электронами. Время релаксации спиновых состояний таких электронов достигает единиц наносекунд, в то время как носитель глубоко локализован в КТ и не может менять место своей локализации, как это происходит в КЯ.

## Методы производства наноструктур

Производство КЯ и КТ требует поддержания особых режимов роста, которые определяются, исходя из материалов подложки и осаждаемого материала, а также требуемой толщиной растущей плёнки. Для роста КЯ используется режим роста Франка – Ван дер Мерве (Frank – Van der Merwe), являющийся механизмом послойного роста. Этот режим реализуется, когда рассогласование решёток между подложкой и выращиваемым слоем не слишком велико.

Если постоянная решётки выращиваемого слоя больше, чем материала подложки, то система деформируется. В гетеропарах, обычно, материал с меньшей шириной запрещённой зоны обладает большей постоянной решётки, таким образом КЯ оказывается сжата в плоскости и растянута в направлении роста. За счёт деформации максимальная толщина КЯ ограничена, превышение определённого предела приводит к формированию дислокаций. Критическая толщина для известного значения рассогласования решёток определяется формулой Мэтьюза-Блексли:

$$\frac{b_x^2 + b_y^2 + (1 - \nu)b_z^2}{8\pi(1 + \nu)b_x h_{cr}} \ln\left(\frac{ah_{cr}}{b}\right) = \varepsilon_m,$$

где  $b_i^2$  – компоненты вектора Бюргерса,  $b/a$  – размер ядра дислокации,  $h_{cr}$  – критическая толщина слоя,  $\varepsilon_m$  – рассогласование параметров решёток.

В полупроводниках КТ можно создать различными способами, включая литографическое вытравливание островка заданных размеров или создание электростатических потенциалов. Такие методы реализуемы, но практически применяются редко из-за относительной сложности в сравнении с методами самоорганизации, которые мы рассмотрим ниже.

При режиме роста Фольмера – Вебера (Vollmer – Weber), осаждаемый материал не полностью смачивает материал подложки и собирается в островки на поверхности. Это происходит в системах, где постоянные решётки очень сильно рассогласованы (более 10%), к примеру, в системах InPSb/InP, GaPSb/GaP, InN/GaN [Nakajima, 1999; Moustakas, 2008; Varabási, 1999]. В системах с меньшим рассогласованием постоянных решёток это также возможно, но на более высокоиндексных направлениях, таких как (110) в системе GaP/GaAs [Simmonds, 2010].

Другой механизм самоорганизации КТ – механизм Странского-Крастанова (Stranski-Krastanow). Он реализуется в системах InAs-GaAs и Ge-Si, за счёт чего приобрёл большую популярность. В этом случае рассогласование решёток между плёнкой и подложкой должно быть существенным, но меньше чем в случае режима Фольмера – Вебера. К примеру, рассогласование достигает 7% для материалов InAs и GaAs или 4% для Si и Ge. В таком случае первые несколько слоёв всё ещё могут сформировать однородную плёнку (т. н. смачивающий слой), но после того, как энергия деформации превысит критическое значение, переход от планарного роста к трёхмерному становится энергетически выгодным. Прерывание роста на короткое время позволяет поверхности дополнительно перестроиться, что в основном сводится к переносу материала смачивающего слоя в КТ, дополнительно снижая упругую энергию системы.

Форма КТ зависит от количества осаждённого материала, можно выделить несколько типичных форм. При малом количестве осажденного вещества формируется большое количество *препирамид*, т.е. не полностью сформированных КТ пирамидальной формы. В процессе дальнейшего роста формируются *пирамиды* – структуры с полноценной огранкой плоскостями {105} в системе Ge-Si или {101} в системе InAs-GaAs. Осаждение ещё большего количества материала приводит к формированию более высоких структур типа *dome*. Обычно они отличаются большей высотой и огранены более высокоиндексными плоскостями. Что касается КТ InGaAs, при малом количестве осажденного вещества, КТ огранена плоскостями {137}, в то время как полностью сформировавшиеся пирамидки огранены плоскостями {101} с рёбрами <111>.

Для применений КТ в оптоэлектронике их обычно не оставляют на поверхности, а зарращивают дополнительным слоем более широкозонного материала, зачастую используется материал подложки. Это необходимо для изоляции КТ от поверхности, тем самым, предотвращая туннелирование носителей из КТ на поверхностные состояния с последующей безызлучательной рекомбинацией, что значительно улучшает их оптическую активность. В процессе зарращивания форма КТ изменяется, в работе [Cherkashin, 2013] было показано, что грани зарращенной КТ представлены плоскостями {203} с рёбрами <332>.

### Квантовые точки и локализованные в них носители заряда

Оптические свойства КТ определяются локализованными в получившейся потенциальной яме носителями. В изучаемых КТ InGaAs потенциал в зоне проводимости позволяет локализовать основное и иногда возбуждённое состояние электрона. Вырожденные в объемном материале уровни тяжелой и лёгкой дырки в районе Г точки зоны Бриллюэна расщепляются под действием сильных деформаций в КТ, что приводит к заглублению уровня тяжелой дырки и выдавливанию из потенциальной ямы уровня лёгкой. С учётом значительной разницы в их эффективных массах тяжелая дырка оказывается локализованной практически на дне потенциальной ямы, в то время как лёгкая может оказаться не локализованной вообще. Мы будем рассматривать локализованные в потенциале КТ тяжёлую дырку и электрон, которые за счёт электростатического взаимодействия образуют электрон-дырочную пару. С учётом электростатического взаимодействия её можно рассматривать как экситон. Варьируя положение уровня Ферми, можно добиваться нахождения в КТ термодинамически-равновесных электронов либо дырок, тогда элементарным возбуждением КТ окажется заряженный экситон (трион).

Потенциал внутри КТ InGaAs определяется несколькими параметрами, основной вклад в которые вносит:

- пространственное распределение концентрации индия  $C_{In}(r)$
- деформационных потенциал
- пьезоэлектричество

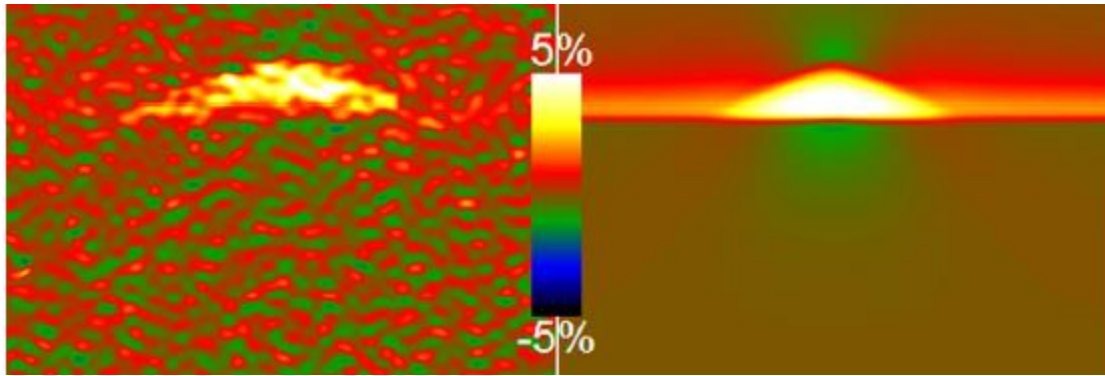
Определение потенциала с учётом этих факторов позволяет достоверно определить волновые функции локализованных там носителей. Задача может быть решена несколькими способами, наиболее простым из которых является однозонное приближение. В таком случае решается стационарное уравнение Шрёдингера для электронов и для тяжелых дырок. Электростатическое взаимодействие может быть учтено различными способами, к примеру решением самосогласованной задачи методом последовательных приближений.

Другим подходом является 8-ми зонная модель, которая даёт наиболее качественное описание получившейся системы т.к. она корректно определяет эффективные массы в такой пространственно-неоднородной системе, учитывает смешивание состояний, а также даёт наиболее корректное представление волновых функций, относительно однозонного приближения. Тем не менее, такая задача более сложна, и во многих случаях однозонного приближения вполне достаточно для описания поведения энергетических уровней в зависимости от каких-либо параметров.

Моделирование состояний, локализованных в КТ, было сделано в работах [Grundman, 1995; Stier, 1999], где локализирующий потенциал учитывал как прямой вклад деформаций, так и индуцированные ими пьезоэлектрические потенциалы. В работе [Grundmann, 1995] моделирование было сделано в однозонном приближении, рассматривались различные системы материалов, такие как InAs/GaAs и InAs/AlAs. В работе [Stier, 1999] применялась уже 8-зонная модель. Следует отметить, что в обоих случаях модели базировались на однородном распределении концентрации In, а также не рассматривала смачивающий слой.

В действительности КТ InAs в GaAs обладает неоднородным пространственными распределениями концентрации In  $C_{In}(r)$  в составляющем её твёрдом растворе  $In_cGa_{1-c}As$ . Форма пространственного распределения In  $C_{In}(r)$  определяется кинетикой роста КТ. При помощи микроскопии можно определить деформации в КТ и окружающим её материале, что позволяет реконструировать пространственное распределение In  $C_{In}(r)$ . Такие исследования проводились различными группами исследователей, например [Bruls, 2002; Blokland, 2009; Naqha, 2009; Sokolov, 2016].

Среди них мы отмечаем работу [Cherkashin, 2013], где использовалась микроскопия высокого разрешения, а также форма  $C_{In}(r)$  для КТ и смачивающего слоя были аппроксимированы аналитическими выражениями. Измеренные поля деформаций в ламели сравнивались с результатами численного моделирования, оптимизация пространственного распределения состава привела к совпадению моделированных и наблюдаемых полей, что показано на рис. 1.4. Приводящие к такому распределению деформаций распределения In были описаны аналитически.

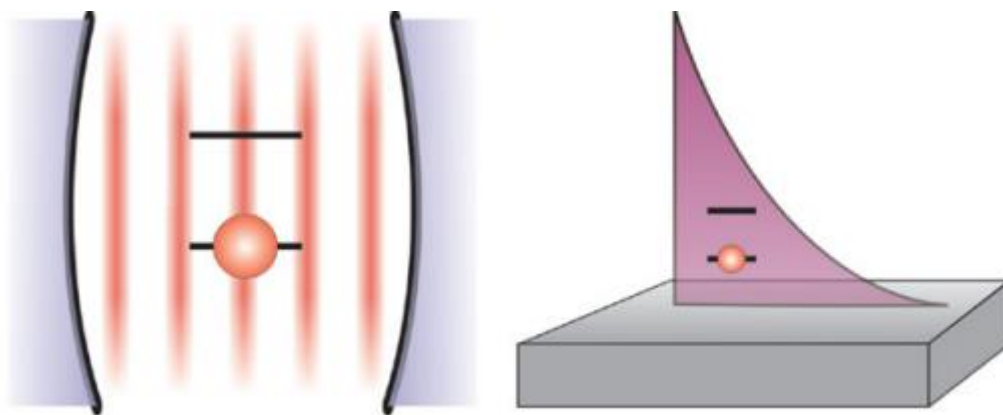


**Рис. 1.4.** Поля деформаций  $\varepsilon_{zz}$  (a) полученные в результате микроскопии высокого разрешения; (b) в результате соответствующего моделирования. Сечение в плоскости XZ [Cherkashin, 2013]

### Гибридные экситон-плазмонные структуры

Хотя КТ является эффективным источником фотонов с высоким квантовым выходом, дипольный момент КТ, отвечающий за взаимодействие со светом, не слишком велик. Время излучательной рекомбинации экситонов, локализованных в КТ велико, и может достигать 1 нс [Salewski, 2017], что является лимитирующим фактором для использования КТ в качестве эффективного источника фотонов, а также лимитирует быстродействие приборов излучательным временем рекомбинации.

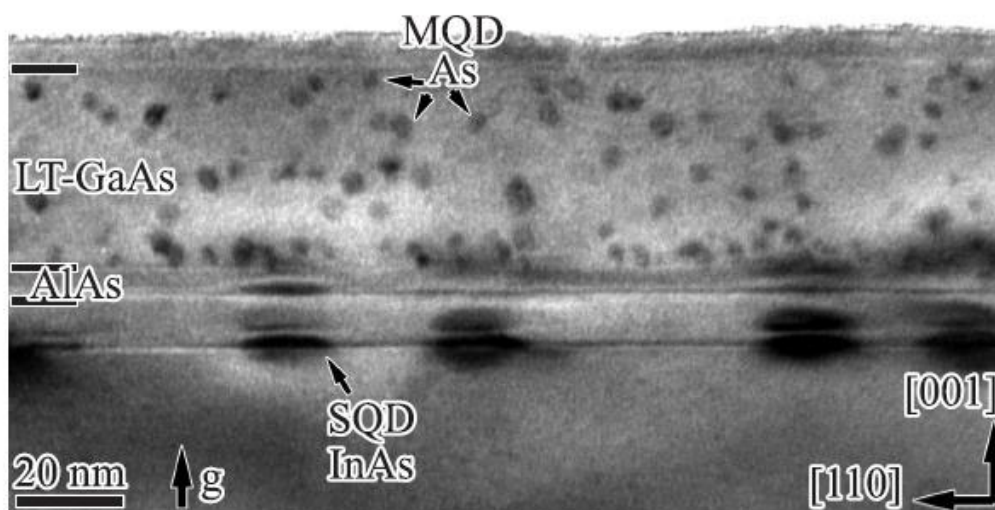
Усиление взаимодействия со светом может быть достигнуто за счёт помещения КТ в разнообразные резонаторы, увеличивающие плотность фотонных состояний, либо гибридизации экситонов с локализованными в металлических наночастицах поверхностных плазмонов, усиливающих интенсивность электрического поля и, практически, выступающими в роли антенны. Схематически такие процессы изображены на рис. 1.5. Обзор разнообразных вариантов реализации таких систем можно найти в работе [Törmä, 2014].



**Рис. 1.5.** Квантовый осциллятор (a), помещённый в резонатор; (b) находящийся в поле поверхностного плазмона. [Törmä, 2014]

Усиление в случае микрорезонатора происходит за счёт эффекта Парселла, который определяется добротностью резонатора и увеличением плотности электромагнитного поля за счёт показателя преломления среды. Хорошим примером может быть работа [Salewski, 2017], где при помощи микрорезонатора было достигнуто двухкратное усиление излучения из образца.

Другим подходом является формирование КТ в ближнем поле металлических наночастиц, выполняющих функцию антенны. Такие системы были реализованы для органических излучателей [Lee, 2007]. Пример механической реализации близкорасположенных систем КТ и металлических наночастиц затруднён тем, что обычно КТ находятся в объеме полупроводникового материала. Существует ряд работ [Nevedomskii, 2009; Nevedomskii, 2011; Nevedomskii, 2013; Nevedomskii, 2014; Bert, 2009], где в непосредственной близости таких КТ были сформированы массивы металлических наночастиц As. Технология базировалась на том, что при выращивании GaAs при пониженной температуре (порядка 200 °C вместо общепринятых 450-600 °C) в плёнке образуется избыток As. Такой материал характеризуется большим количеством точечных антиструктурных дефектов As<sub>Ga</sub>. Из-за большого числа дефектов времена жизни неравновесных носителей в таких материалах сопоставимы с временами жизни в металлах. При отжиге избыточный As формирует наночастицы, размер которых варьируется в пределах от единиц до пары десятков нанометров. На рис. 1.6 показано изображение, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Видно, что за счёт упругих полей создаваемых КТ, положения КТ и металлических наночастиц коррелированы. Расстояние между ними значительно меньше, чем длина волны излучения КТ в среде.



**Рис. 1.6.** Изображение InAs КТ и близкорасположенных наночастиц As, полученных методом ПЭМ в светлом поле [Nevedomskii, 2013].

Таким образом мы показали, что эпитаксиальные КТ, в частности, сделанные на основе соединений InGaAs, являются перспективным материалом для современной оптоэлектроники. Тем не менее, существует ряд проблем, решение которых способно улучшить существующие приборы на основе КТ, а также открывает возможность для создания новых. Одними из наиболее важных направлений исследований являются изучение физических механизмов и способов управления глубиной локализации и временем жизни носителей заряда, локализованных в КТ. Модельным и практически важным объектом исследования являются самоорганизованные КТ InGaAs, окруженные барьерным слоем GaAs.

Другой важной областью изучения является создание гибридизированных структур, где КТ InGaAs совмещаются с металлическими наночастицами. Хотя возможность их физического совмещения уже была показана, оптические свойства таких структур малоизучены. На основе анализа состояния исследований КТ были сформулированы цели и задачи работы, приведенные во введении.

## Глава 2. Особенности локализации носителей в самоорганизованных квантовых точках InGaAs

КТ, полученные методом самоорганизации, обладают способностью локализовать носители заряда во всех трех направлениях, за что их иногда называют «искусственными атомами» [Alferov, 2001; Ashoori, 1996]. Из-за хорошо отработанного процесса производства они могут быть включены во многие электронные, оптические и оптоэлектронные приборы, такие как лазеры, солнечные элементы или одноэлектронные запоминающие устройства (см., например, недавние обзоры [Bayer, 2019; Sautter, 2020] и ссылки там). Наиболее популярными методами их производства являются МЛЭ либо ГФЭ. В данной работе мы рассматриваем КТ, выращенные при помощи МЛЭ, где самоорганизация происходит за счёт механизма Странского-Крастанова, который реализуется путём трансформации двухосно-напряженного эпитаксиального слоя в систему трехмерных островков. Этот переход обусловлен минимизацией упругой энергии. Для дальнейшего применения КТ, выращенные этим методом, обычно заращаются материалом барьера, что технологически согласуется с любыми процессами эпитаксиального выращивания приборных структур на основе GaAs или родственных соединений  $A_3B_5$ . Методы самоорганизации также хорошо разработаны для создания КТ в самых разных системах материалов, включая InAs-GaAs-InP-GaSb [Sautter, 2020], Ge-Si [Brunner, 2002], InN-GaN-AlN [Adelmann, 2000] и т. д.

КТ InGaAs, сформированные на поверхности GaAs, а затем заращенные слоем этого материала, наиболее популярны в настоящее время, а также имеют практическую значимость. Варьируя концентрацию In в  $In_xGa_{1-x}As$ , можно менять ширину запрещённой зоны этого материала в пределах от 0.4 эВ для чистого InAs до 1.5 эВ в чистом GaAs. Таким образом, КТ InGaAs потенциально могут перекрывать очень широкий и важный для практических применений инфракрасный оптический диапазон, включая телекоммуникационную полосу на длине волны 1.55 мкм (0.8 эВ). В реальности этот диапазон значительно меньше за счёт двух явлений. С одной стороны, размерное квантование увеличивает энергию локализованных носителей в КТ, что особенно ярко проявляется при размерах КТ от единиц до нескольких десятков нанометров в направлении роста, в котором толщина КТ наименьшая. С другой стороны, рассматриваемая КТ, как и большинство гетероструктур, оказываются механически деформированы за счёт различий в постоянных решёток используемых материалов, что приводит к изменению самого квантового потенциала. Как правило, материалы с наименьшей запрещённой зоной в гетеропаре обладают большей постоянной решётки и, следовательно,



оказываются сжаты в таких гетероструктурах как КЯ и КТ. Их упругое сжатие приводит к увеличению ширины запрещённой зоны. В этой главе изучаются способы оптимизации КТ, позволяющие увеличить глубину локализации носителей заряда.

Расчёты были сделаны численно методом конечных разностей (МКР), уравнения решались для КТ InGaAs пирамидальной формы находящейся в GaAs. Исходя из пространственного распределения In определялись механические деформации, которые необходимо учесть при определении локализирующего потенциала для электронов и тяжелых дырок. В этих потенциалах решалось стационарное уравнение Шрёдингера для определения энергии и волновых функций КТ в однозонном приближении без учёта взаимодействия между электронами и дырками. Модель была верифицирована сравнением с аналогичными расчётами, сделанными [Grundman, 1995] и [Stier, 1999], а также экспериментальными данными. Представленная модель не является уникальной и достаточно упрощена относительно более полной 8-ми зонной модели в работе [Stier, 1999]. Тем не менее, рассмотрения при помощи такой модели вполне достаточно для изучения локализации носителей в КТ в зависимости от её формы, окружения, либо внутреннего состава.

*В первом разделе этой главы мы проводим систематическое исследование совместного действия вкладов упругих деформаций и размерного квантования на глубину локализации носителей в КТ. Изменение высоты КТ при сохраняющемся объеме приводит не только к изменению энергии размерного квантования за счёт изменений линейных размеров, но и к перераспределению компонент упругой деформации. Эти эффекты хорошо известны по отдельности в упругой, либо квантовой механике, но их совместное действие до сих пор не рассматривалось. В частности, была обнаружена нетривиальная зависимость энергии электронов, тяжелых дырок и, соответственно, энергии излучаемых фотонов от соотношения высоты и длины основания КТ. Зависимость обладает минимумом, который определяет оптимальную геометрию КТ, соответствующую наилучшей локализации носителей заряда. С учётом практической значимости самоорганизованных КТ, учёт этих механизмов практически важен для проектирования оптических свойств КТ и приборов на их основе, в частности для получения наибольшей локализации носителей.*

*Во втором разделе этой главы мы рассматриваем структуру DWELL, где КТ заращена квантовой ямой. Такие структуры позволяют существенно сдвинуть оптические спектры системы КТ в красную область, что важно для практических применений, в частности в полосе длин волн вокруг 1.55 мкм. Ранее*

наблюдаемое экспериментально изменение спектральных характеристик объяснялось качественно, основными механизмами назывались увеличение объема КТ, а также ослабление деформаций за счёт формирования КЯ. На основе нашей модели это изменение в  $\approx 165$  мэВ было количественно описано за счёт совместного действия *трёх* механизмов сопровождающих формирование КЯ, а именно изменения объема КТ, изменения формы КТ, а также действием КЯ на упругие деформации внутри КТ. Понимание этих механизмов несёт практическую значимость для использования структур DWELL.

Обычно моделирование оптических свойств КТ проводилось в приближении однородного состава, как это было сделано в первых двух разделах этой главы или работах [Grundman, 1995] и [Stier, 1999]. Тем не менее, существует экспериментально верифицированное и аналитически описанное пространственное распределение In внутри InGaAs КТ. В *третьем разделе этой главы* мы рассматриваем модель КТ на основе экспериментально верифицированного пространственного распределения состава материала InGaAs, а также экспериментально наблюдаемых оптических свойств. Создание такой модели является важным шагом на пути от абстрактных моделей к экспериментально верифицированным. Такие модели позволяют нам обнаружить нетривиальные особенности формы волновых функций электронов и дырок в КТ, к примеру в этой работе мы показываем существование минимума волновой функции тяжелой дырки в центре КТ. Такая информация является практически значимой для различных оптических свойств КТ, в том числе для расчётов интегралов перекрытия волновых функций электронов и дырок, времён излучательной релаксации или компонент дипольного момента. Использование модели КТ, основанной на экспериментально верифицированных данных, открывает путь для контроля упомянутых оптических свойств за счёт проектирования её формы.

## Методы

Все расчёты в этом разделе были сделаны на основе одинаковых математических моделей, отличающихся в основном пространственными распределениями  $C_{In}(r)$  раствора  $In_cGa_{1-c}As$ , но устроенных одинаково.

Исходя из пространственного распределение  $C_{In}(r)$  мы определяли упругие деформации, полая, что структура не содержит дефектов кристаллической решётки. Поля деформаций определялись при помощи формализма линейной механики сплошных сред, а именно, решением уравнений равновесия и уравнений обобщённого закона Гука в тензорной форме, учитывающей анизотропию кристаллического материала:

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (2.1)$$

Здесь  $\sigma$  – тензор напряжений Коши (2го ранга),  $C$  – тензор упругих констант (4го ранга) и  $\varepsilon$  – тензор упругих деформации (2го ранга).

Уравнение решалось методом конечных разностей (МКР) в трехмерной ячейке размером  $100 \times 100 \times 120$  нм<sup>3</sup>, где КТ была расположена на глубине 60 нм от поверхности. Размеры были выбраны таким образом, чтобы упругие деформации на её границах были незначительны. Верхняя поверхность ассоциирована с поверхностью образца, таким образом, на неё накладывалось граничное условие свободной поверхности т.е. отсутствия приложенных сил. На оставшиеся границы налагалось условие нулевого смещения в направлении перпендикулярном этим границам.

Положение энергетических уровней определялось решением уравнения Шрёдингера в однозонном приближении для электронов и дырок по отдельности. Большинство параметров в  $\text{In}_c\text{Ga}_{1-c}\text{As}$  определялась при помощи закона линейной интерполяции, в частности закона Вегарда, исходя из параметров  $\text{InAs}$  и  $\text{GaAs}$ . Тем не менее, для таких параметров как ширина запрещённой зоны и статическая диэлектрическая проницаемость учитывалось квадратичное «провисание» зависимости. Набор параметров, который был использован в настоящей работе представлен в таблице 2.1.

Параметр		Значение
Постоянная решётки	Нм	$0.5653(1-c) + 0.6058c$
Ширина запрещённой зоны	эВ	$1.507(1-c) + 0.405c - 0.475c(1-c)$
Эффективная масса в ЗП	$m_0$	$0.067 - 0.044c$
Эффективная масса в ВЗ	$m_0$	$0.51 - 0.1c$
Гидростатический потенциал в ЗП $a_c$	эВ	$-8.013 + 2.933c$
Гидростатический потенциал в ВЗ $a_v$	эВ	$-0.220 - 0.780c$
Девиаторный потенциал в ВЗ $b_v$	эВ	$-1.824 + 0.024c$
Сдвиговый потенциал ВЗ $d_v$	эВ	$-5.062 + 1.462c$
Упругая константа $C_{11}$	ГПа	$119 - 35.6c$
Упругая константа $C_{12}$	ГПа	$53.4 - 8c$
Упругая константа $C_{14}$	ГПа	$56.9 - 17.4c$
Статическая диэл. проницаемость		$12.89 + 1.35c + 0.76c^2$
Пьезоэлектрический модуль $e_{14}$	кД м <sup>-2</sup>	$0.16 - 0.11c$

**Таблица 2.1.** Параметры материала  $\text{In}_c\text{Ga}_{1-c}\text{As}$

Квантующий потенциал при отсутствии упругих деформаций определялся величиной запрещённой зоны  $E_g(C_{\text{In}}(r))$ , которая зависит от локального состава твёрдого раствора  $\text{In}_c\text{Ga}_{1-c}\text{As}$ . Мы использовали разрыв  $E_g$  80:20, таким образом, потенциальная яма твёрдого раствора  $\text{In}_c\text{Ga}_{1-c}\text{As}$  для электронов оказалась

значительно глубже ямы для дырок. Полученные потенциалы корректировались за счёт вклада упругих деформаций для электронов и дырок по-разному. Поправка в потенциал для электронов зависела только от гидростатических деформаций и определялась как [Bir, 1974]:

$$\delta E_e = a_c tr(\varepsilon(\mathbf{r})), \quad (2.2)$$

где  $a_c$  – гидростатический потенциал электронов, он отрицателен и, таким образом, при отрицательном значении следа тензора деформации ширина запрещённой зоны  $E_g$  увеличивается. Девиаторные и сдвиговые компоненты тензора деформации отвечают за сдвиг и изменение формы. Они приводят к снятию вырождения тяжелой и лёгкой дырок на потолке валентной зоны в центре зоны Бриллюэна. Таким образом, валентная зона оказывается чувствительна как к гидростатическим деформациям, так и к девиаторным и сдвиговым. Соответствующая поправка к потенциалу определяется следующим выражением [Bir, 1974]:

$$\delta E_h = a_h tr(\varepsilon) \pm \sqrt{\frac{b^2}{2} [(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})^2 + (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{yy})^2]} + d^2(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2), \quad (2.3)$$

где  $a_h$  – гидростатический потенциал дырок,  $b$  и  $d$  – деформационные потенциалы девиаторных и сдвиговых деформаций.

Пьезоэлектрический эффект в полупроводники типа  $A_3B_5$  существенен при определённых условиях. Электрическая поляризация пьезоэлектрика из-за упругих деформаций определяется следующим выражением:

$$P = e \cdot \varepsilon \quad (2.4)$$

здесь  $e$  – пьезоэлектрический модуль, являющийся тензором 3-го ранга. В полупроводниках с симметрией цинковой обманки только элементы  $e_{14}=e_{15}=e_{16}$  не равны нулю, что является следствием симметрии  $T_d$ . Пьезоэлектрический потенциал внутри КТ образует октауполь, при этом, средняя глубина локализуемого потенциала не изменяется. Такой потенциал внутри КТ в основном локализован в окрестности интерфейсов, где сдвиговая деформация максимальна, а волновая функция имеет достаточно малое значение, как будет показано в разделе 2.3. Симметрия пьезоэлектрической компоненты такова, что модифицирует форму квантового потенциала, но не изменяет его среднее значение и практически не даёт вклада в изменение энергии состояний [Grundman, 1995] и [Stier, 1999]. В объёме квантовой точки величина пьезоэлектрического потенциала мала по сравнению с другими компонентами. Так как мы уделяем основное внимание именно энергии носителей, но не их

волновой функции мы пренебрегаем этой поправкой в рамках наших исследований, как было сделано в таких работах как [Grundman, 1995] и [Stier, 1999].

В полученном потенциале МКР решалось стационарное уравнение Шрёдингера отдельно для электронов и дырок. На верхней и нижней поверхности ячейки использовалось граничное условие равенства нулю волновой функции. Для сторон ячейки использовалось условие равенства нулю потока волновой функции. Модель верифицировалась сравнением с результатами расчетов с использованием восьмизонной  $k \cdot p$ -модели, полученными в работе [Stier, 1999] для пирамидальных КТ InAs с гранями {101}. Мы используем набор параметров материалов, представленный в работе [Adachi, 2009]. Подробности расчетов можно найти в работе [A4].

Самоорганизующиеся КТ на основе разных систем материалов во многом схожи. В качестве референтной структуры использовались КТ, чья геометрия и оптические свойства нам известны. Мы рассматриваем пирамидальные КТ InAs, полученные по стандартной технологии МЛЭ на подложках (001) GaAs. Они были выращены в режиме роста Странского-Крастанова при осаждении пяти монослоев (МС) InAs со скоростью 0.05 МС/с при температуре 460°C, которые были зарращены слоем GaAs толщиной 30 нм при скорости осаждения 0.3 нм/с без изменения температуры. Более подробное описание процесса роста и получившейся структуры можно найти в работе [Bert, 2009].

ПЭМ высокого разрешения показал, что в изучаемой структуре типичные КТ, сформированные в объеме GaAs путем само-организации по механизму Странского-Крастанова и последующего зарращивания материалом барьера, имеют форму пирамиды с квадратным основанием, высота которой  $H = 9 \pm 0.5$  нм и ширина основания  $L = 28 \pm 0.5$  нм [Cherkashin, 2013]. Рёбра параллельны [100] и [010], КТ InGaAs в объеме GaAs имела грани {203} с ребрами  $\langle 332 \rangle$ .

## 2.1 Локализация носителей заряда в самоорганизованной квантовой точке: взаимодействие вкладов квантовой и упругой механик в энергию локализованных носителей заряда.

### Введение

Энергия излучения из КТ зависит от положения уровней энергии локализованных в ней носителей заряда, определяющиеся квантовой механикой на основе локализующего потенциала. Вклад размерного квантования в энергию локализованных в КТ носителей существенен, но его можно ослабить увеличением размера КТ. При этом механические деформации остаются. Значительное рассогласование постоянных решеток и, связанные с этим, механические деформации являются движущей силой самоорганизации и, следовательно, их невозможно избежать. Более того, полная упругая энергия, запасенная в КТ, пропорциональна объему КТ и, следовательно, увеличивается с его ростом. Более того, если объем КТ превысит определенное значение, это может вызывать релаксацию упругих напряжений за счёт формирования дислокаций несоответствия [Chaldyshev, 2009]. Дислоцированные КТ не подходят для большинства применений, так как теряют оптическую активность из-за безызлучательной рекомбинации электронов и дырок через промежуточные состояния, появившиеся на оборванных химических связях в ядре дислокации.

Форма КТ зависит от режима роста, в частности, от количества осаждённого материала и условий созревания [Daruka, 1999; Kratzer, 2006; Ту, 2007]. Форма КТ Ge или InAs на поверхности (001) (Si или GaAs соответственно) обычно близка к пирамиде с квадратным основанием, лежащим в плоскости роста (001), и сторонами, образованными наборами плоскостей {105} для Ge [Teichert, 2002] или наборами плоскостей {101} для InAs [Ruvimov, 1995]. Распределение механических напряжений в окрестности КТ, а также структура волновых функций электронов и дырок в пирамидальных КТ InAs с интерфейсами {101} с барьером GaAs, изучались Стиром и др. [Stier, 1999]. Сформированные на поверхности КТ изменяют свою форму и состав в процессе зарастивания в объём материала [Rastelli, 2001; Cherkashin, 2013]. Очевидно, что это ведёт к перераспределению упругих полей, и вызывает существенное изменение энергий локализованных в них носителей, которое может быть получено прямыми квантово-механическими расчетами [Vorobiev, 2013].

В этом разделе мы показываем, что влияние различных компонент упругих деформаций на локализующий потенциал электронов и дырок, с одной стороны, и зависимость энергии размерного квантования от формы КТ, с другой стороны, создают нетривиальный минимум энергии электронов и дырок при

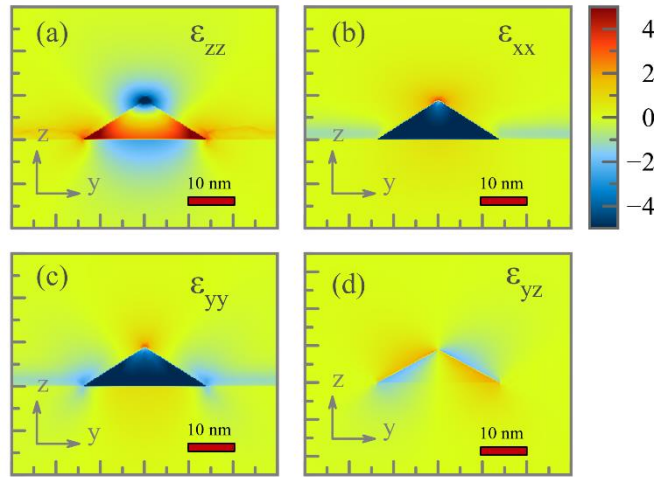
определённом соотношении сторон КТ. Таким образом можно получить максимально возможную длину волны оптического излучения для любого заданного объема КТ.

### Исследуемая структура

Параметры референтной КТ описаны в разделе методы этой главы. В этом разделе мы использовали КТ однородного состава с концентрацией  $C_{In} \approx 90\%$ , точное значение выбиралось для соответствия результатам моделирования оптическим спектрам. Геометрия смачивающего слоя соответствовал экспериментально-верифицированным пространственным распределениям  $In$ , полученным в работе [Cherkashin, 2013], где проводился анализ изображений ПЭМ высокого разрешения для референтного образца. На основе этих данных, сначала мы решали задачу механики твердого тела для КТ референтного размера, а также КТ того же объёма, где мы варьировали соотношение сторон в пределах  $0.05 < H/L < 1.75$ . В этой ситуации малые значения соотношения сторон соответствуют сплюсненной по вертикали КТ, в то время как большие соответствуют её вытянутости в вертикальном направлении. Ячейка, в которой производился расчет, была заполнена GaAs, в её центре находилась КТ InGaAs, помещённая в смачивающий слой. Мы использовали граничные условия отсутствия смещения в направлении перпендикулярном поверхности ячейке на всех границах кроме верхней, где использовалось условие свободной поверхности, т.е. равенство нулю сил на её границе.

### Результаты и обсуждение результатов

В результате моделирования были получены поля деформаций и напряжений в объеме ячейки. Пространственная зависимость компонент тензора упругих деформаций представлена на рис. 2.1 для референтной КТ InGaAs. Показанное сечение КТ сделано плоскостью ZY, проходящей через ось симметрии, параллельную ребрам [010] основания пирамиды. Сжатие в плоскости роста структуры (компоненты  $\epsilon_{xx}$  и  $\epsilon_{yy}$ ) проявляется для всего объема КТ. Деформация в направлении роста структуры (то есть в направлении от основания к вершине пирамиды)  $\epsilon_{zz}$  положительна в объеме КТ, но отрицательна вблизи вершины. Компонента сдвига  $\epsilon_{yz}$  существенно отлична от нуля на гранях {203}, являющихся границами раздела InGaAs-GaAs, и в непосредственной близости от них. Все компоненты тензора упругих деформаций быстро уменьшаются в окружающем КТ барьере GaAs.



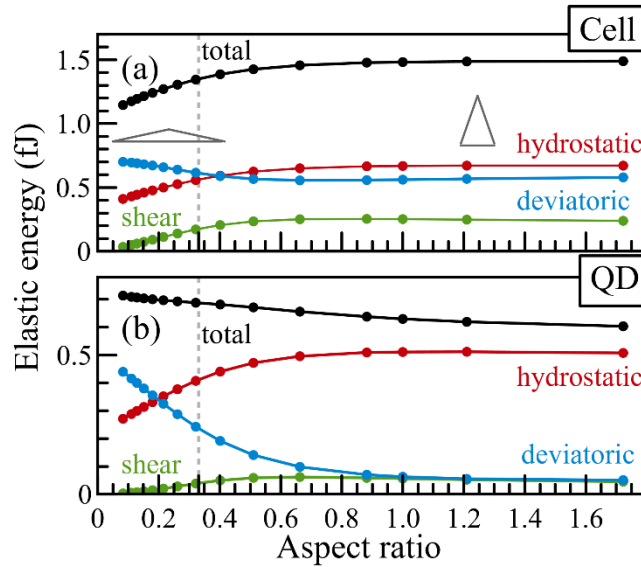
**Рис. 2.1.** Упругие деформации в плоскости  $YZ$ , проходящей через ось симметрии пирамиды, полученные в результате моделирования. Различные компоненты показаны в секциях (a)  $\varepsilon_{zz}$ , (b)  $\varepsilon_{xx}$ , (c)  $\varepsilon_{yy}$ , (d)  $\varepsilon_{yz}$ . Показана только центральная часть ячейки, в которой проводился расчёт.

Качественно распределение деформаций и напряжений остается одинаковым для всех рассматриваемых форм, однако количественные значения различных компонент меняются. Для дальнейшего анализа удобно перейти к рассмотрению компонент энергии, связанных с различными типами упругой деформации. Полная энергия упругой деформации может быть представлена через тензор механических напряжений  $\sigma$  и тензор упругих деформаций  $\varepsilon$  следующим образом:

$$W_{\text{total}} = \int \left[ \frac{1}{6} \text{tr}(\varepsilon) \cdot \text{tr}(\sigma) + \left( \frac{1}{2} \varepsilon_{ii} \cdot \sigma_{ii} - \frac{1}{6} \text{tr}(\varepsilon) \cdot \text{tr}(\sigma) \right) + \varepsilon_{ij} \cdot \sigma_{ij} \right] dV. \quad (2.5)$$

По повторяющимся индексам  $i$  и  $j$  производится суммирование. Здесь первое слагаемое в квадратных скобках представляет собой гидростатическую энергию, связанную со всесторонним сжатием. Второе слагаемое связано с двухосным сжатием и будет называться девиаторными. Последнее слагаемое, в котором  $i > j$ , учитывает сдвиговые недиагональные компоненты. Можно ассоциировать первое слагаемое с изменением объема, а оставшиеся с изменением формы. Полная упругая энергия и ее составляющие представлены на рис. 2.2 в зависимости от соотношения сторон  $H/L$  КТ. На верхней части рисунка показана суммарная энергия во всей ячейке, а на нижней показана упругая энергия в объеме КТ.





**Рис. 2.2.** Компоненты упругих энергий в зависимости от соотношения сторон  $H/L$  квантовой точки. (a) интегрирование по всему объему ячейки, в которой проводился расчёт; (b) внутри КТ. Чёрная линия – полная энергия, красная – гидростатическая компонента, синяя линия – девиаторная, зелёная – сдвиговая. Серая вертикальная штриховая линия соответствует геометрии референтной КТ.

Чёрная линия на рис. 2.2 (a) показывает, что полная упругая энергия внутри ячейки уменьшается при меньшем соотношении сторон. Это означает, что существует термодинамическая движущая сила, которая вызывает уменьшение отношения размеров  $H/L$  КТ в процессе зарастивания. Такое явление экспериментально наблюдалось для InAs, Ge и других самоорганизующихся КТ [Teichert, 2002; Rastelli, 2001; Cherkashin, 2013; Bert, 2009]. Интересно отметить, что гидростатическая часть упругой энергии в основном накапливается внутри КТ, тогда как девиаторная и сдвиговая компоненты энергии в окружающем GaAs. Этот результат хорошо согласуется с предсказаниями упрощенных аналитических моделей включений [Eshelby, 1959; Eshelby, 1957; Mura, 1987; Bert, 2002].

Поведение полной энергии внутри КТ отличается от полной энергии в ячейке, она увеличивается при уменьшении соотношения сторон, т.е. уплощении. Важным фактом является то, что это увеличение происходит за счёт девиаторной компоненты упругой энергии. Это неудивительно, ведь при малом соотношении сторон механическое поле КТ приближается к полю двухосно сжатой тонкой плёнки с почти нулевой сдвиговой составляющей.

На основе рассчитанных полей механических деформаций мы решили стационарное уравнение Шрёдингера для электронов и дырок отдельно в приближении эффективной массы. В этом разделе мы не обсуждаем структуру соответствующих волновых функций, т.к. мы использовали тривиальное

однородное распределение  $\ln$  внутри КТ. Такие волновые функции обсуждались в работе [Stier, 1999], поэтому мы сосредоточимся исключительно на собственных значениях энергии для основного состояния электронов и дырок.

Локализирующий потенциал электронов и дырок описан в разделе методы этой главы. С учётом малости сдвиговых компонент в объеме КТ, где волновая функция максимальна, а также с учетом симметрии, мы упростили поправку к потенциалу дырок до:

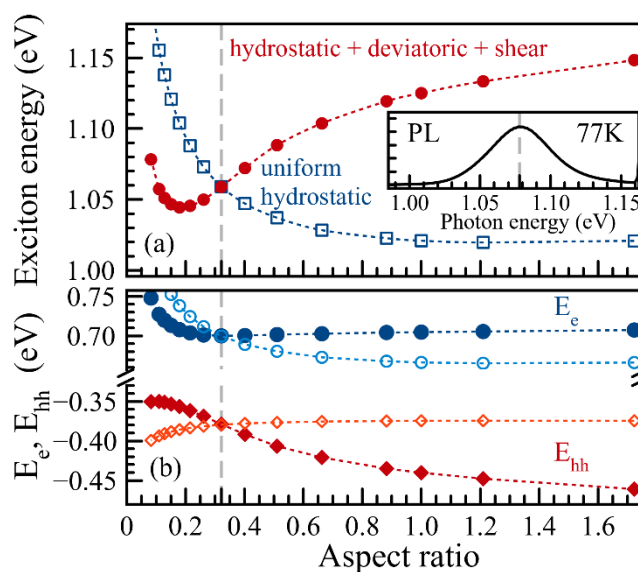
$$\delta E_h \approx a_h \cdot \text{tr}(\varepsilon) \pm b (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz}) \quad (2.6)$$

Для корректного учёта механических деформаций задача квантовой механики решалась на той же конечно-разностной сетке, что и задача упругой механики твёрдого тела. Рассчитанные собственные значения энергий электронов и тяжелых дырок в зависимости от соотношения сторон  $H/L$  показаны на рис. 2.3(b) при помощи закрашенных синих кружков и красных ромбов соответственно. Вертикальная серая пунктирная линия отмечает соотношение сторон референтной КТ.

Основное состояние электрона имеет хорошо выраженный энергетический минимум, когда  $H/L \approx 0.2$ . Энергия электрона быстро растет при меньших значениях соотношения сторон из-за более сильного квантования в направлении  $z$ . Относительно медленное увеличение энергии при увеличении  $H/L$  происходит из-за роста гидростатической компоненты деформации, что видно из рис. 2.2 (b). Влияние размерного квантования на основное состояние тяжелых дырок намного слабее, чем на электроны, т.к. у первых значительно большая эффективная масса. Энергия основного состояния тяжелых дырок увеличивается с уменьшением  $H/L$  в результате перераспределения упругой энергии из гидростатической в девиаторную за счёт увеличения расщепления тяжелых и лёгких дырок. Эта зависимость показана на рис. 2.2(b). Положительный сдвиг  $\delta E_h$  возникает из-за девиаторного члена в уравнении (2.5), который преобладает над гидростатической составляющей. Отметим, что положительный сдвиг означает более сильную локализацию дырок в КТ.

Энергия экситона, соответствующая наблюдаемому оптическому переходу, состоит из энергии электрона, энергии дырки (показаны на рис. 2.3 (b)) и энергии их связи. Мы полагаем энергию связи равной 20 мэВ и, в первом приближении, не зависящей от формы КТ. Полученная зависимость энергии экситонного перехода изображена на рис. 2.3 (a) красными кружками, она имеет ярко выраженный минимум вблизи  $H/L \approx 0.2$ , который соответствует максимально возможной локализации как электронов, так и тяжелых дырок.

Эта дополнительная энергия локализации, которую можно получить, варьируя форму КТ превышает 0.1 эВ.



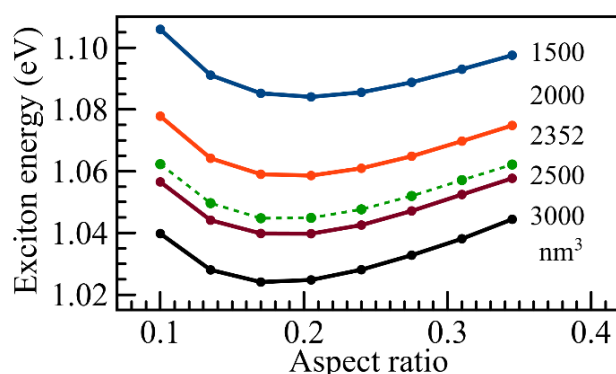
**Рис. 2.3.** (а) энергия экситона в зависимости от соотношения сторон КТ  $H/L$ . Красные точки соответствуют представленной модели, синие квадраты – изотропной гидростатической деформации. На вставке экспериментально измеренный спектр ФЛ, записанный при температуре 77К; (б) энергии основных состояний электронов (синие точки) и дырок (красные ромбы), рассчитанные при помощи рассматриваемой модели. Для сравнения незаполненные значки показывают аналогичные зависимости в приближении изотропной гидростатической деформации.

Серая вертикальная пунктирная линия на рис. 2.3 отмечает  $H/L \approx 0.32$ , соответствующее форме референтной КТ InGaAs, экспериментально исследованной в работе [Cherkashin, 2013]. На вставке рис. 2.3 (а) показан экспериментальный спектр ФЛ, измеренный при 77 К. Хотя спектр достаточно широк из-за распределения размеров в ансамбле КТ, энергия фотонов в его максимуме хорошо соответствует расчетному значению. Таким образом, используемая численная модель подтверждена экспериментальными исследованиями: просвечивающей электронной микроскопией и оптическим исследованием.

Для лучшего понимания обнаруженного явления были проведены дополнительные модельные расчеты виртуальных КТ с однородным полем гидростатических деформаций. Величина деформации была скорректирована для получения той же энергии экситона, что и для референтной КТ. Рассчитанные энергии основных состояний электрона и дырки показаны на рис. 2.3 (б) светлыми кружками и ромбами. В этой модели ни электроны, ни дырки не имеют минимума энергии при какой-либо предпочтительной форме.

Сравнение результатов двух модельных расчетов показывает, что подходящее соотношение сторон пирамидальной КТ InGaAs может обеспечить дополнительную энергию локализации носителей заряда за счет создания поля внутренних деформаций с оптимальным распределением энергии между девиаторной и гидростатической компонентами. По сравнению с использованием исключительно однородного поля гидростатических деформаций, которое может быть реализовано в сферическом нановключении, пирамидальная КТ того же объема с соотношением сторон 0.18 обеспечивает усиление локализации более чем на 0.1 эВ.

Уплотнение с сохранением объема типичной пирамидальной КТ InGaAs, выращенной на поверхности и ограниченной плоскостями {101}, до геометрии референтной КТ ( $H/L \approx 0.32$ ) должно увеличить глубину локализации её носителей на 30 мэВ. Дальнейшее уплотнение до соотношения сторон 0.18 должно дополнительно увеличить локализацию на 15 мэВ. Таким образом, вариация соотношения сторон КТ даёт нам возможность увеличить глубину локализации носителей на 45 мэВ.



**Рис. 2.4.** Зависимости энергии экситона от соотношения сторон  $H/L$  для КТ разного объема. Зелёная штриховая линия соответствует референтной КТ.

Самоорганизованные КТ в любом ансамбле имеют определенное распределение по размерам, обусловленное стохастическим характером кинетики самоорганизации под действием термодинамической силы. Следующим шагом будет проверка существования оптимального размера в КТ различных объемов. Расчёты, аналогичные вышеупомянутым, были проведены для КТ с объемами большими (а именно, 2500 и 3000 нм<sup>3</sup>) и меньшими (а именно, 1500 и 2000 нм<sup>3</sup>), чем объем референтной КТ, составляющий 2352 нм<sup>3</sup>. На рис. 2.4 показан расчёт энергии излучения экситона из КТ, когда  $H/L$  выбрано в окрестности минимума энергии. Зеленая пунктирная линия представляет референтную КТ, повторяя красную кривую, показанную на Рис. 2.3 (а). Разность энергий экситонов для наибольшего и наименьшего объемов КТ на рис. 2.4 примерно соответствует

ширине экспериментального спектра фотолюминесценции, показанного на вставке рис. 2.3 (а).

С ожидаемым сдвигом по шкале энергий из-за зависимости энергии размерного квантования от объема КТ все кривые на рис. 2.4 подобны и предсказывают наименьшую энергию экситона при  $H/L \approx 0.17-0.2$ . Это означает, что если путем изменения процедуры роста удастся сделать все КТ более плоскими, то увеличение локализации носителей коснётся всего ансамбля КТ.

Упругая энергия КТ многократно превышает энергию экситона: для референтной КТ полная упругая энергия составляет около 1.5 фДж, тогда как энергия локализации носителей заряда составляет около 0.0001 фДж. Таким образом, минимизация энергии локализованных носителей при росте не может быть движущей силой изменения геометрии КТ.

Самоорганизованные КТ на свободной поверхности могут иметь достаточно большое отношение  $H/L$ . Например, обычные КТ InAs с гранями {101} имеют  $H/L = 0.5$ . Изменение полной упругой энергии в процессе зарастивания обеспечивает термодинамическую силу для уплощения формы КТ. Это создаёт основу для проектирования распределения внутренних деформаций для достижения необходимой локализации носителей.

## Заключение

Для рассмотренных выше пирамидальных КТ InGaAs наши расчеты предсказывают наименьшую энергию оптического излучения, когда отношение высоты к основанию близко к 0.2. Для КТ с большим соотношением сторон перераспределение внутренней деформации может обеспечить существенную дополнительную энергию локализации носителей. Этот эффект является результатом одновременного действия упругой механики кристаллических решеток и квантовой механики локализованных электронов и дырок. Наблюдаемый эффект применим к КТ в традиционных системах III-V, III-N, II-VI, Si-Ge и других материальных системах. Конкретный вид зависимости, аналогичной наблюдаемой на рис. 2.3, зависит от выбранного материала, в особенности от его анизотропных упругих параметров и устройства зоны Бриллюэна для электронов и дырок.

## 2.2 Локализация носителей в структуре квантовая точка в квантовой яме.

### Введение

Спектральное смещение энергии экситона, локализованного в КТ, в сторону больших энергий может быть достигнуто за счет уменьшения размера КТ на стадии самоорганизации или благодаря пост-ростовому отжигу [Petrov, 2008]. Смещение в меньшие энергии более проблематично, так как максимальный размер КТ ограничен, и при его превышении когерентность интерфейса может быть нарушена за счёт дислокаций [Chaldyshev, 2020]. Как мы уже показывали, глубина локализации носителей существенно ограничена механическими деформациями, возникающими благодаря рассогласованию решеток, необходимых для процесса самоорганизации по механизму Странского-Крастанова [Stranski, 1937]. Такие ограничения не позволяют КТ InGaAs в барьере GaAs генерировать излучение с энергией менее 1.125 эВ. Глубина локализации важна для большинства практических приложений, так как этот параметр важен для предотвращения термического выброса локализованных носителей из КТ в барьерную область. Как было показано выше, один из вариантов её усиления — это оптимизация формы и соотношения сторон [A4].

Здесь мы рассматриваем альтернативный вариант усиления локализации и спектрального смещения излучения из КТ в сторону больших длин волн, а именно встраивание квантовой точки в квантовую яму. Такая структура называется DWELL (dot in a well) и впервые была получена Устиновым с соавторами [Ustinov, 1999] и Ниши с соавторами [Nishi, 1999]. Они показали, что излучение из КТ InAs может быть сдвинуто в длинноволновую область вплоть до 1.3 мкм, если КТ помещена в InGaAs КЯ.

Это спровоцировало серию работ, см., например, работы [Lui, 2004; Erza, 2013; Erza, 2014; Wolde, 2017; Torchynska, 2018; Asahi, 2019; Li, 2019], где DWELL изучались как экспериментально, так и с помощью моделирования. В частности, было показано, что красное смещение экситонного оптического излучения InGaAs зависит от геометрии КТ, а также толщины и химического состава КЯ. Интересно отметить, что экспериментальная оптимизация параметров DWELL привела к аналогичным результатам многочисленным независимым исследовательским группам. Наибольшие смещения спектра излучения КТ в длинноволновую область при помощи структуры DWELL относительно обычных КТ в объеме GaAs были достигнуты в следующих работах: 160 [Ustinov, 1999], 140 [Nishi, 1999], 130 [Niu, 2001], 160 [Liu, 2000], 120 мэВ [Tatebayashi].

В этом разделе работы мы показываем, что DWELL обеспечивает наиболее глубокую локализацию носителей заряда за счет комплексного действия *trpex*

процессов: увеличения объема КТ, изменения соотношения высоты к основанию КТ и перераспределения деформации между различными компонентами под действием упругого поля КЯ. Мы анализируем потенциал применения этой методики для усиления локализации за счёт вышеупомянутых вкладов, а также описываем оптимальную конфигурацию DWELL, поддерживающую когерентность интерфейса.

### Исследуемая модель

Мы рассматриваем DWELL в рамках комплексной модели [A4], описанной в разделе методы и применённую в предыдущем разделе. Она учитывает взаимодействие между упругой механикой и квантовой механикой локализованных электронов и дырок. Мы изучаем DWELL на основе гетеропары InAs и GaAs, поскольку они широко используются, благодаря чему существует большое количество надежных экспериментальных данных для проверки результатов наших расчетов. Тем не менее, качественно результаты могут быть применены к любым системам материалов.

Используемая здесь геометрия модели аналогична описанной в [A4]. Мы исследуем пирамидальную КТ InGaAs высотой  $H$  в направлении роста [001]. КТ либо встроена в объемный GaAs (QDB – quantum dot in bulk), либо встроена в квантовую яму InGaAs толщиной  $h$  (DWELL), как показано на рис. 2.5 (a) и (b). Геометрия изучаемой КТ InGaAs подтверждается данными ПЭМ [Ustinov, 1999; Cherkashin, 2013; Ruvimov, 1995]. При моделировании варьировались следующие параметры: длина основания КТ  $L$ , соотношение сторон  $H/L$ , толщина КЯ  $h$  и ее химический состав  $C_{In}$ .

Методика получения локализуемых потенциалов на основе упругих деформаций описана в начале главы. Мы использовали КТ однородного состава и решали задачу в одноэлектронном приближении. Полученные волновые функции не представляют особого интереса, мы сосредоточимся исключительно на собственных значениях энергии для основных состояний электрона и дырки в КТ в зависимости от параметров изучаемой структуры. Мы рассматриваем преимущественно тяжелые дырки, т.к. в КТ InGaAs подзона тяжелых дырок обладает наименьшей энергией [Stier, 2002].

Для простоты анализа, аналогично предыдущему разделу, мы разделяем тензор упругих деформаций  $\varepsilon$  на гидростатическую (h), девиаторную (d) и сдвиговую (s) составляющие следующим образом:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{ij}^h &= \text{tr}(\varepsilon)\delta_{ij}/3, \\
\varepsilon_{ij}^d &= \varepsilon_{ij}\delta_{ij} - \varepsilon_{ij}^h, \\
\varepsilon_{ij}^s &= \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}\delta_{ij},
\end{aligned}
\tag{2.7}$$

где  $\delta_{ij}$  —  $\delta$ -функция Кронекера. Соответствующие плотности упругой энергии можно рассчитать для каждой компоненты поля упругих деформаций-напряжений как

$$\begin{aligned}
w &= w^h + w^d + w^s = \text{tr}(\varepsilon)\text{tr}(\sigma)/6 \\
&+ [\varepsilon_{ii}\sigma_{ii}/2 - \text{tr}(\varepsilon)\text{tr}(\sigma)/6] + \varepsilon_{ij}\sigma_{ij}/2, i \neq j.
\end{aligned}
\tag{2.8}$$

По повторяющимся индексам предполагается суммирование.

Указанные компоненты тензора деформации влияют на локализирующий потенциал различным образом [Bir, 1974]. Гидростатическое сжатие увеличивает ширину запрещенной зоны InGaAs, для зоны проводимости и валентной зоны сдвиги выглядят как:  $\Delta E_c = a_c \text{tr}(\varepsilon)$  и  $\Delta E_v = a_v \text{tr}(\varepsilon)$ , где деформационные потенциалы для электронов и дырок  $a_c < 0$ ,  $a_v > 0$ , при  $|a_c| \gg a_v$ .

Девиаторная и сдвиговая деформации расщепляют зоны тяжёлых и лёгких дырок:  $\Delta E_v = \pm b \sqrt{-3 \text{inv}_2(\varepsilon^d)}$  и, соответственно,  $\Delta E_v = \pm d \sqrt{-\text{inv}_2(\varepsilon^s)}$ , где  $\text{inv}_2$  — это второй инвариант тензора.

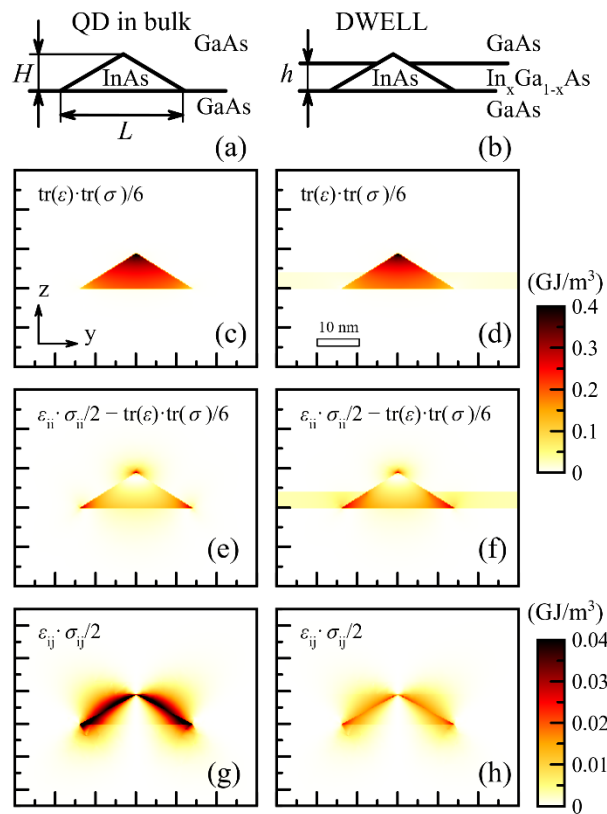
На рис. 2.5 представлены распределения упругой энергии в плоскости YZ, проходящей через центр симметрии, связанные с гидростатическими (c) и (d), девиаторными (e) и (f) и сдвиговыми (g) и (h) деформациями для случаев QDB (c,e,g) и DWELL (d,f,h). На рисунках показана только часть ячейки в окрестности КТ. Для обоих случаев высота КТ  $H = 9$  нм, а ее основание  $L = 28$  нм, что соответствует экспериментальным наблюдениям КТ InGaAs, самоорганизованных методом Странского-Крастанова и выращенных толстой плёнкой GaAs [Cherkashin, 2013]. Толщина КЯ InGaAs  $h = 3.85$  нм, концентрация индия  $C_{\text{In}} = 30$  %. КЯ с такими параметрами использовались в работах [Ustinov, 1999; Nishi, 1999] для достижения наиболее глубокой локализации носителей в DWELL.

## Результаты и обсуждение результатов

Упругая энергия КЯ соответствует двухосной деформации с двумя составляющими: гидростатической и девиаторной, которые показаны желтыми



полосами на рис. 2.5 (d) и (f). Эти плотности энергии, конечно, могут быть рассчитаны 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 тензора упругих констант могут быть определены для InGaAs в линейном приближении. Тогда для КЯ InGaAs, параллельной плоскости (001), 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  $w_{QW}^h \approx 0.015$  ГДж/м<sup>3</sup> в рассматриваемой КЯ с  $C_{In} = 0.3$  и плотность девиаторной энергии  $w_{QW}^d \approx 0.03$  ГДж/м<sup>3</sup>. Энергия сдвиговой деформации для КЯ в гетероструктуре равна 0.



**Рис. 2.5.** Сравнение QDB (левая колонка) и DWELL (правая колонка). (a) и (b) схематически показывают структуры рассматриваемых моделей, а также вводят основные параметры, используемые при моделировании. (c) и (d) показывают плотность гидростатической компоненты упругой энергии; (e) и (f) показывают плотность девиаторной компоненты упругой энергии; (g) и (h) показывают плотность сдвиговой компоненты упругой энергии. Сечения сделаны плоскостью YZ, проходящей через ось симметрии КТ.

Распределение упругой деформации, как и компонент её энергии внутри КТ неравномерно, но для QDB и DWELL оно качественно схоже. Наибольшая плотность гидростатической энергии соответствует вершине КТ, где она

достигает  $0.45 \text{ ГДж/м}^3$ . Эта величина одинакова для QDB и DWELL в конфигурации, изображенной на рис. 2.5, когда КЯ не закрывает вершину КТ. Плотность гидростатической энергии постепенно уменьшается сверху вниз, где  $w_{QDB}^h \approx 0.2 \text{ ГДж/м}^3$  и  $w_{DWELL}^h \approx 0.18 \text{ ГДж/м}^3$ . Интегрирование по объему пирамиды показывает, что гидростатическая энергия уменьшается в сумме с  $0.51 \text{ фДж}$  в случае QDB до  $0.45 \text{ фДж}$  в случае DWELL.

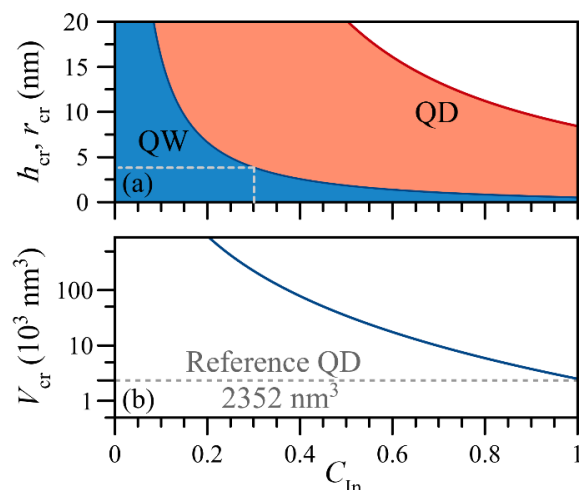
Плотности девиаторной энергии представлены на рис. 2.5 (e) и (f). В обоих случаях она, в основном, сосредоточена у основания пирамиды.  $w_{QDB}^d \approx 0.08 \text{ ГДж/м}^3$  в центре и  $w_{QDB}^d \approx 0.23 \text{ ГДж/м}^3$  в углах. Плотность такой энергии быстро уменьшается к вершине пирамиды, где КТ испытывает преимущественно гидростатическую деформацию, но индуцирует зону девиаторной деформации в окружающей матрице GaAs. Хотя QDB и DWELL показывают похожее распределение девиаторной энергии внутри КТ, имеются количественные различия:  $w_{DWELL}^d \approx 0.1 \text{ ГДж/м}^3$  в центре основания пирамиды и  $w_{DWELL}^d \approx 0.25 \text{ ГДж/м}^3$  в углу. Интегрирование по объему показывает, что при помещении КТ в КЯ без изменения геометрии КТ общее количество девиаторной энергии внутри КТ увеличилось на 25% с  $0.24 \text{ фДж}$  в QDB до  $0.32 \text{ фДж}$  в DWELL.

Плотности сдвиговой энергии, представленные на рис. 2.5 (g) и (h) в основном сосредоточены вблизи краев КТ вокруг интерфейса с барьером. Её плотность в самом объеме КТ крайне мала, и следовательно её влияние на волновую функцию также невелико. Полная энергия сдвига, интегрированная по объему КТ, как в случае QDB, так и в случае DWELL, оказалась малой по сравнению с гидростатической и девиаторной энергиями. Обратите внимание, масштаб для  $w^s$  в (g) и (h) на порядок меньше по сравнению с панелями для  $w^h$  и  $w^d$ . Для QDB самая высокая плотность энергии составляет около  $0.04 \text{ ГДж/м}^3$ . В случае DWELL распределение деформации сдвига аналогично, но соответствующая ей плотность энергии в 2.5 раза меньше. Это неудивительно, т.к. концентрация In, а следовательно, и постоянная решётки, в  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  претерпевает значительно меньшие изменения на границе с КЯ, чем с барьерным материалом GaAs.

Для рассмотренных выше геометрий численное решение квантово-механической задачи с локализирующим потенциалом, учитывающим полученные поля деформаций-напряжений, показывает, что в DWELL локализация как электронов, так и дырок глубже, чем в QDB. Глубина локализации увеличивается на 52 мэВ, что приводит к смещению спектра излучения на эту величину в длинноволновую область. Тем не менее, эта величина существенно меньше экспериментально наблюдаемой величины 140 – 160 мэВ [Ustinov, 1999; Nishi, 1999]. Расхождение указывает на существование других механизмов увеличения локализации при заращивании КТ в КЯ, в

частности, изменение формы и объема КТ в дополнение к индуцированной КЯ модификации деформаций.

Перед тем как рассматривать эти дополнительные механизмы мы проанализируем, какого максимального усиления локализации можно добиться вариацией высоты КЯ и концентрации In в её составе. Очевидно, более высокий  $C_{In}$  может обеспечить более сильную модификацию поля деформации-напряжения в КТ. Более толстая КЯ может распространить эту модификацию на весь объем КТ, включая ее верхнюю часть.



**Рис. 2.6.** (а) Зависимость критической толщины КЯ и критического радиуса сферической КТ в зависимости от концентрации In; (б) критический объем сферической КТ InGaAs в зависимости от концентрации In в ней. Все зависимости рассчитаны для структур, находящихся в матрице GaAs.

Тем не менее, увеличение толщины КЯ  $h$  и концентрации индия  $C_{In}$  приводит к увеличению упругой энергии либо из-за большего рассогласования решеток, либо из-за большего объема напряженного слоя. Когда упругая энергия превышает определенный порог, она вызывает образование дислокаций несоответствия. Критические параметры можно определить по формуле Мэтьюза-Блейкли [Matthews, 1974]:

$$\frac{b_x^2 + b_y^2 + (1 - \nu)b_z^2}{8\pi(1 + \nu)b_x h_{cr}} \ln \frac{\alpha h_{cr}}{b} = \varepsilon_m, \quad (2.9)$$

где  $b_x$ ,  $b_y$ ,  $b_z$  — компоненты вектора Бюргерса,  $b/\alpha$  — радиус отсечки ядра дислокации. В расчетах учитывались дислокации с вектором Бюргерса  $b = \frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ , наклоненным под углом  $60^\circ$  к линии дислокации и под углом  $45^\circ$  к (001). Такие дислокации ответственны за процесс релаксации в пленках GaAs или InGaAs [Matthews, 1974; Bert, 2009]. Синее поле на рис. 2.6 (а) показывает область

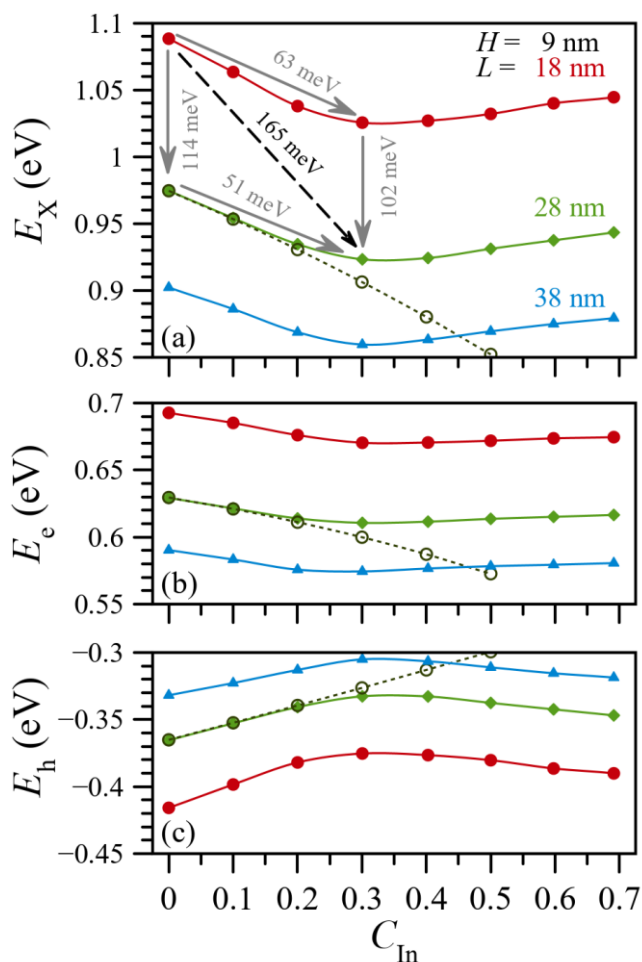
в координатах  $h$  и  $C_{In}$ , где бездислокационная КЯ InGaAs термодинамически устойчива на подложке GaAs с ориентацией (001). Параметры, отмеченные серыми пунктирными линиями, использовались в работах [Ustinov, 1999; Nishi, 1999] и в наших расчетах, описанных выше.

На рис. 2.7 представлены результаты квантово-механических расчетов энергий основного состояния электрона, дырки и экситона, локализованных в DWELL, имеющих следующие параметры. Высота КТ InAs 9 нм, 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 КЯ  $h$  для каждого  $C_{In}$  принимается равной критическому значению, определяемому уравнением (2.9) и показанному на рис. 2.6 (а) синей линией. Для большей наглядности мы также проводим расчеты для КТ InAs с основанием 28 нм и высотой 9 нм, которая полностью покрыта КЯ, так что термодинамический предел когерентности интерфейса не учитывается. Результаты этих расчетов нанесены серыми кружками, соединенными пунктирными линиями. Рис. 2.7 (а) показывает энергию экситона, (б) энергию электрона и (с) энергию тяжелой дырки.

Из рис. 2.7 следует, что локализация как электронов, так и дырок в КТ глубже с ростом  $C_{In}$  в КЯ за счет большей модификации поля деформаций. Однако, требование когерентности интерфейса КЯ ограничивает толщину КЯ с более высоким  $C_{In}$ , так что КТ находится в основном вне слоя, где поле деформации модифицируется при помощи КЯ. Исходя из графиков на рис. 2.7 (а) мы видим, что наибольшая локализация достигается при КЯ с параметрами  $C_{In} = 0.3$ ,  $h = 3.85$  нм вне зависимости от длины основания КТ. Стоит отметить, что этот набор параметров КЯ был экспериментально найден как наиболее эффективная конфигурация DWELL в работах [Ustinov, 1999; Nishi, 1999; Niu, 2001; Liu, 2000; Tatebayashi, 2001].

Геометрии КТ, соответствующие трем кривым со значками на каждой панели рис. 2.7, были выбраны по следующим причинам. Полностью сформированные КТ InAs на поверхности GaAs обычно имеют грани {101} [Kratzer, 2006], что соответствует соотношению сторон пирамиды  $H/L = 0.5$  и длине основания  $L = 18$  нм при высоте  $H = 9$  нм. Тем не менее, объем и форма КТ изменяются при заращивании барьерным материалом [Kratzer, 2006; Daruka, 1999; Songmuang, 2003; Tu, 2007]. Для КТ InGaAs, заращенных слоем GaAs, с помощью ПЭМ высокого разрешения была обнаружена огранка плоскостями {203} [Cherkashin, 2013], что соответствует соотношению сторон пирамиды  $H/L = 0.32$  и длине основания  $L = 28$  нм при  $H = 9$  нм. Также, анализ, проведенный в работе [A4] показано, что оптимальное соотношение сторон, равно примерно 0.2, что

обеспечивает наиболее глубокую локализацию носителей в КТ InAs любого заданного объема, сформированной в объеме GaAs. Примем для расчетов  $L = 38$  нм, что соответствует  $H/L = 0.24$  при  $H = 9$  нм. Таким образом, эти три геометрии соответствуют трём потенциально оптимальным конфигурациям.



**Рис. 2.7.** Энергия (а) экситона, (b) электрона и (c) тяжелой дырки, локализованных в InGaAs КТ в зависимости от концентрации In в КЯ. При этом высота КТ всегда составляла 9 нм, в то время как, длина основания была 18, 28 или 38 нм, что соответствует красным кружкам, зелёным ромбам или синим треугольникам. Серые кружки соответствуют КЯ с высотой 9 нм, в то время как, высота других КЯ варьировалась в зависимости от состава, чтобы сохранять бездислокационную структуру.

Следует отметить, что, хотя малое соотношение  $H/L$ , соответствующее сплюснутой в направлении роста точке, термодинамически выгодно для выращенных КТ [A4], соотношение сторон зависит от кинетики роста, т.е. от технологического процесса. В случае выращивания КТ InAs барьерным материалом GaAs, уменьшение соотношения сторон происходит при неизменном объеме КТ, так как отсутствует внешний источник атомов In при

осаждении верхнего барьера GaAs. В случае DWELL в окрестности КТ имеется много In, доступного для расширения основания КТ в процессе формирования InGaAs КЯ. В этом случае изменение длины основания  $L$  должно происходить при почти постоянной высоте КТ  $H$ . Это утверждение подтверждается исследованием ПЭМ при сравнении InAs QDB и DWELL [Ustinov, 1999; Ruvimov, 1995].

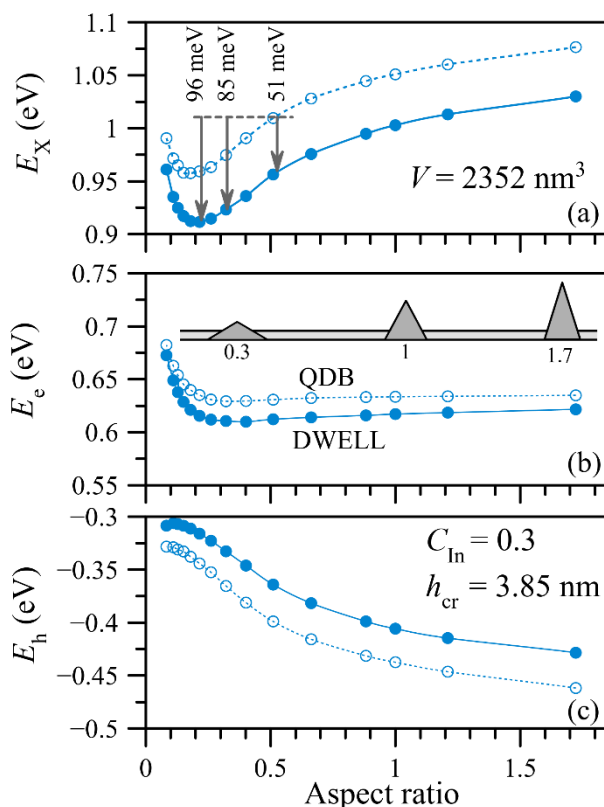
Полная упругая энергия КТ пропорциональна ее объему, который растет с увеличением длины основания при неизменной высоте пирамиды. Когда достигается определенный критический объем, упругая энергия должна релаксировать за счет образования дислокационных петель несоответствия. Упрощённое рассмотрение сферической КТ [Chaldyshev, 2020; Kolesnikova, 2007] даёт нам формулу, определяющую критический радиус КТ  $r_{cr}$ :

$$\frac{3b}{4\pi(1+\nu)r_{cr}} \ln \frac{\alpha r_{cr}}{b} \approx \varepsilon_m. \quad (2.10)$$

Формула (2.10) аналогична рассмотренной выше формуле (2.9). Зависимость критического радиуса от концентрации  $C_{cr}(r_{cr})$  изображена на рис. 2.6 (а) красной линией. Красная область под кривой показывает все возможные конфигурации КТ в пространстве  $r_{cr}$   $C_{cr}$ , не нарушающие когерентности интерфейса. Соответствующий критический объем КТ в зависимости от  $C_{In}$  представлен на рис. 2.6 (b). Из расчетов следует, что для КТ InAs (т.е.  $C_{In} = 1$ ) критический объем близок к объему пирамиды с высотой  $H = 9$  нм и основанием  $L = 28$  нм ( $V = 2352$  нм<sup>3</sup>). КТ с большими основаниями термодинамически неустойчивы по отношению к образованию дислокаций несоответствия. Например, КТ высотой 9 нм и длиной основания 38 нм имеет объем в 2 раза больше критического.

Как мы видим, требования когерентности интерфейса накладывают сильное ограничение на состав и геометрию КТ и КЯ. Это ограничение устанавливает предел улучшения локализации носителей в DWELL по сравнению с QDB КТ. Наибольшее красное смещение экситонного излучения пирамидальной КТ InGaAs высотой  $H = 9$  нм показано на рис. 2.7 (а) штриховой стрелкой и составляет 165 мэВ. Оно соответствует КЯ толщиной 3.85 нм, имеющей концентрацию  $C_{In} = 0.3$ . В работах [Ustinov, 1999; Nishi, 1999] показано, что именно такая конфигурация DWELL обеспечивает наибольшее красное смещение. Расчетный сдвиг экситонного излучения на 165 мэВ хорошо согласуется с экспериментальным достижением Устинова и др. (160 мэВ) [Ustinov, 1999].

Для более глубокого понимания явления разложим суммарную величину красного смещения на вклады, связанные с модификацией поля деформационно-напряжения на за счет КЯ, увеличением объема КТ и изменением отношения сторон КТ. Первый вклад можно оценить из рис. 2.7 как разность энергий экситонов в КТ, окружённых КЯ с разной концентрацией In т.е.  $E_x(C_{In} = 0) - E_x(C_{In} = 0.3) = (51 \div 63)$  мэВ.



**Рис. 2.8** Энергии (a) экситонов, (b) электронов и (c) тяжёлых дырок в зависимости от соотношения сторон пирамидальной КТ InAs, имеющей постоянный объем. Точки и кружки соответствуют DWELL и QDB соответственно.

Чтобы разделить вклады объема и соотношения сторон, мы изменяем последние, в то время как объем КТ остается зафиксированным. Результаты расчетов энергий локализованных электронов ( $E_e$ ), дырок ( $E_h$ ) и экситонов ( $E_x$ ) представлены на рис. 2.8. Объем изучаемой КТ InGaAs составляет  $2352 \text{ nm}^3$ , что соответствует референтной КТ. На рис. 2.7 ему соответствуют зеленые линии с ромбами для КТ с  $H = 9 \text{ nm}$  и  $L = 28 \text{ nm}$ . Синие закрашенные точки на рис. 2.8 представляют случай DWELL с КЯ InGaAs толщиной  $h = 3.85 \text{ nm}$  и с  $C_{In} = 0.3$ . Незакрашенные кружки представляют случай QDB КТ InGaAs в объемном GaAs. Для обоих случаев зависимости энергий носителей от соотношения сторон аналогичны, но локализация DWELL на  $\approx 51$  мэВ глубже. Одновременное действие квантовой механики и механики твердого тела обеспечивает ярко выраженный минимум энергии экситона, когда соотношение сторон близко к

0.2 как для QDB, так и для DWELL. Соотношение сторон, экспериментально наблюдаемое Устиновым и соавторами, в случае DWELL было 0.32. Уменьшение энергии экситона в DWELL составляет 34 мэВ при уменьшении соотношения сторон от 0.5 до 0.32. Полное красное смещение экситонного состояния равно 85 мэВ при неизменном объеме КТ. Дальнейшее уплотнение до оптимального соотношения сторон 0.2 может дать дополнительное красное смещение энергии экситона, на 11 мэВ увеличив глубину локализации до 96 мэВ.

Таким образом, мы разделяем вклады в энергию экситона от изменения объема КТ и изменения её формы примерно, как 78 и 36 мэВ, соответственно. Результирующее красное смещение составляет 114 мэВ при увеличении основания КТ  $L$  от 18 до 28 нм при осаждении КЯ InGaAs. Наличие КЯ добавляет дополнительные 51 мэВ из-за перераспределения поля деформаций, а общее усиление локализации экситона достигает 165 мэВ. Это значение находится в очень хорошем количественном соответствии с лучшими экспериментальными достижениями [Ustinov, 1999; Nishi, 1999].

Наши расчеты предсказывают предел улучшения локализации экситонов для системы DWELL InAs-GaAs по сравнению с QDB InAs, он составляет 176 мэВ. Когда объем КТ строго ограничен требованиями когерентности интерфейса, максимально сильная локализация носителей может быть достигнута, если в процессе зарастивания получить оптимальное соотношение сторон КТ, равное примерно 0.2. Отметим, что уплотнение КТ в процессе зарастивания термодинамически выгодно [A4] и, следовательно, возможно.

Есть несколько явлений, таких как перемешивание In-Ga и флуктуации состава сплава, которые могут изменить компоновку модели. Согласно наблюдениям ПЭМ [Ustinov, 1999], эти явления оказывают незначительное влияние при обычной процедуре роста, однако они могут стать актуальными в случаях высокотемпературной обработки или сильно неравновесного роста. Такие случаи заслуживают специального рассмотрения, которое выходит за рамки данной работы.

## Заключение

В этом разделе мы исследовали локализацию носителей заряда пирамидальной КТ InAs, которая может быть усилена, если КТ помещается в КЯ InGaAs. Мы определили *три* вклада в увеличение глубины локализации, а именно перераспределение упругих полей, увеличение объема КТ и уменьшение соотношения сторон КТ. Величина этих вкладов ограничена условиями когерентности интерфейса как для QD, так и для QW. Мы проанализировали поле упругих деформаций в условиях соблюдения когерентности для наиболее популярного DWELL, состоящего из КТ и КЯ в системе InGaAs. Для этой



системы достигается очень хорошее количественное совпадение результатов наших расчетов с имеющимися экспериментальными данными. В оптимальной конфигурации DWELL суммарное влияние КЯ InGaAs на локализацию носителей в КТ InAs может достигать 176 мэВ с точки зрения красного смещения энергии локализованного экситона. Мы разложили это красное смещение энергии экситона на *три* составляющие, соответствующие увеличению объема КТ (78 мэВ), уменьшению отношения размеров КТ (47 мэВ) и перераспределению поля упругих деформаций благодаря формированию КЯ (51 мэВ). Все три вклада имеют схожий порядок величины и должны быть рассмотрены совместно. Наши результаты являются качественно универсальными и могут быть легко адаптированы к любым аналогичным системам DWELL, таким как InAs-InP, GaSb-AlAs и т. д.

## 2.3 Экспериментально-верифицированное моделирование квантовой точки системы InGaAs

### Введение

Оценка фактической формы и распределения индия в КТ, находящихся в объеме GaAs, является чрезвычайно сложной задачей, для решения которой требуются сложные методы характеристики. Авторы в работе [Walther, 2001] сообщают о первом исследовании распределения In в разбитой на островки плёнке InGaAs на поверхности GaAs (001). Проблема сегрегации индия и изменения формы КТ в процессе зарастивания была рассмотрена в работе [Brulis, 2002] с помощью сканирующей туннельной микроскопии в поперечном сечении. Авторы определили реальную геометрию КТ и выявили градиент индия от основания к вершине. Форма трёхмерного распределения индия реконструирована в [Inoue, 2008] с помощью сканирующего просвечивающего электронного микроскопа. Авторы также наблюдали сегрегацию индия вблизи вершины КТ. ПЭМ-изображения высокого разрешения и голограммы электронов в темном поле были проанализированы в [Cherkashin, 2013], что позволило точно описать форму и трехмерное распределение индия в неусеченных КТ InGaAs.

Тем временем, в отсутствие точных структурных данных расчет поля напряжений-деформаций с последующим решением задачи квантовой механики выполнялся на модели пирамиды с основанием (001) и гранями {110} [Grundmann, 1995]. Перераспределение материала в процессе зарастивания учитывалось в работе [A4]. Однако в работах [Grundmann, 1995; A4], как и в других работах (см., например, [Pryor, 1998; Stier, 1999; Zielke, 2014]) используется упрощенная модель с однородным распределением In внутри КТ InGaAs.

В данном разделе мы рассматриваем экспериментально полученное распределение In и форму КТ InGaAs, рассчитываем соответствующие деформационные потенциалы на основе экспериментально полученных полей деформации высокого разрешения и решаем задачу квантовой механики для электронов и дырок в однозонном приближении. Результаты верифицируются сравнением с экспериментально полученным спектром оптического излучения ансамбля КТ того же образца, а также сравнением предыдущими работами. Структурные и оптические данные оказались хорошо согласованными друг с другом в рамках используемой модели. В результате была обнаружена нетривиальная форма волновой функции для основного состояния локализованных дырок.

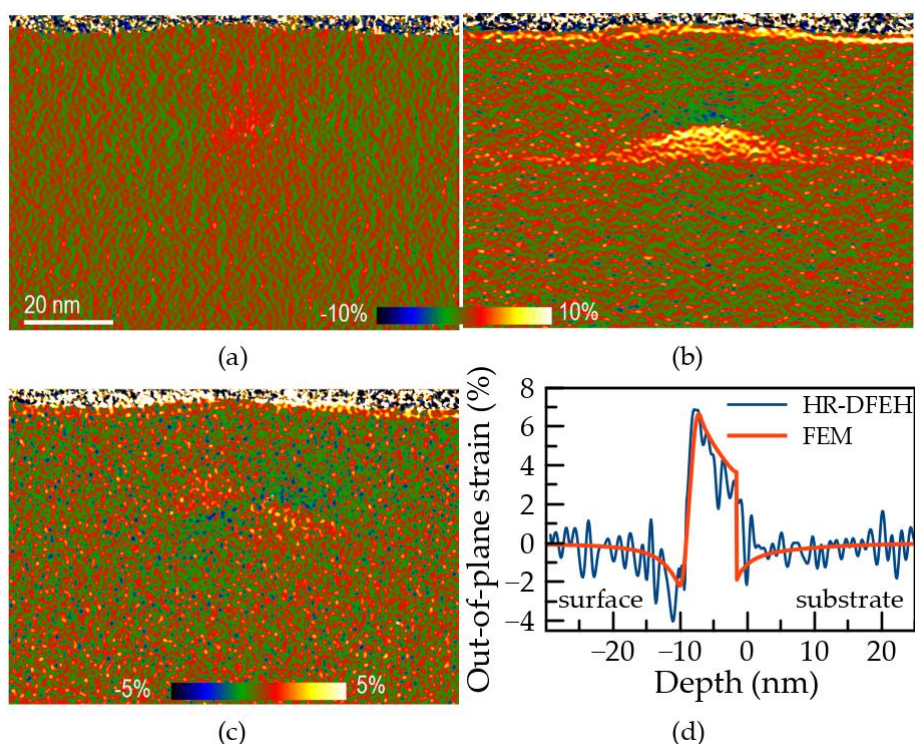
## Материалы и методы

В этом разделе исследовались выращенные неусеченные пирамидальные КТ InGaAs, которые были выращены при помощи механизма роста Странского-Крастанова методом МЛЭ при 460 °С.

Геометрия и химический состав КТ InGaAs ранее изучались методами геометрического фазового анализа изображений на основе ПЭМ высокого разрешения и темнопольной электронной голографии в режиме Лоренца [Cherkashin, 2013]. Оба метода предоставили двухмерные изображения тензора деформации с пространственным разрешением не более 1 нм. ПЭМ проводились с использованием I2ТЕМ Toulouse, HF-3300 (Hitachi High-Tech Corporation, Токио, Япония), работающего с напряжением 300 кВ, оснащенного источником излучения холодного поля, корректором аберраций изображения (СЕОS В-COR), система с несколькими бипризмами и ПЗС-камерой 4К. Такой ПЭМ позволяет проводить эксперименты с DFЕН с положением держателя образца внутри линзы объектива. В результате можно применить коррекцию аберрации изображения и получить максимальное расстояние между полосами голограммы 0.1 нм, что важно для анализа чрезвычайно тонких границ раздела и слоев [Ledentsov, 2018; Di Russo, 2019]. Интерференционные полосы голограмм существенно менее чувствительны к фокусу, неоднородности толщины ламелей и химическим изменениям, чем изображения HR-ТЕМ [Walther, 1995]. В этом эксперименте HR голограммы были записаны с использованием векторов дифракции  $g = 111$  и  $g = 004$  для КТ, находящейся в тонкой пластинке толщиной 10–20 нм соответствующей поперечному сечению плоскостью (110). Было проанализировано несколько КТ. Поскольку результаты аналогичны, мы приводим данные только для одной КТ.

На рис. 2.9 показаны компоненты тензора деформации в плоскости (а), перпендикулярно плоскости (b) и деформации сдвига (с), полученные методом HR-DFЕН применительно к решетке GaAs с пространственным разрешением 0.6 нм и точностью 0.4%. Для начала отметим, что представленные результаты качественно согласуются с ранее полученными с использованием альтернативных подходов [Cherkashin, 2013]. Внутри, ниже и выше КТ видна деформация растяжения в плоскости, достигающая наибольших значений вблизи вершины КТ рис. 2.9(a). Пирамидальная форма КТ отражается в распределении деформации растяжения перпендикулярно плоскости роста рис. 2.9 (b). Растянутая в плоскости решетка GaAs приводит к сжатию решетки в перпендикулярном направлении, что особенно ярко выражено в окрестности вершины КТ. Смачивающий слой имеет нулевую по отношению к GaAs деформацию в плоскости (рис. 2.9 (a)) и быстро уменьшающуюся деформацию

растяжения в перпендикулярном направлении (рис. 2.9(b)). Деформация сдвига имеет обратную зеркальную симметрию относительно центральной вертикальной оси КТ (рис. 2.9(c)). При сравнении резкости границ раздела КТ на рис. 2.9 с полученной в [Cherkashin, 2013] видно, что границы действительно резкие, а их размытие, обнаруженное в [Cherkaschin, 2013], обусловлено в первую очередь более низким пространственным разрешением методов, использованных в [Cherkaschin, 2013].



**Рис. 2.9.** (a–c) Компоненты тензора деформации, определенные относительно решетки GaAs, и (d) вертикальный профиль деформации в направлении роста, проходящий через вершину КТ в (b), полученный методом HR-DFEH: (a) в плоскости, (b) вне плоскости, (c) деформации сдвига

Экспериментально-верифицированная модель формы КТ InGaAs, её атомной структуры и химического состава использовалась в расчетах МКР следующим образом. Во-первых, на основе пространственного распределения  $C_{In}$  в твёрдом растворе  $In_cGa_{1-c}As$  мы решили линейную задачу механики твёрдого тела для референтной КТ, встроенной в пластину толщиной 10 нм. Для этого использовались те же входные параметры модели, что и в [Cherkashin, 2013], для формы КТ, размеров, ориентации основания и трехмерного распределения компонент индия.

Система координат определена следующим образом:  $z$  совпадает с направлением роста  $[001]$ , и оси  $x$  и  $y$  мы ориентируем в плоскости вдоль

кристаллографических направлений [100] и [010]. Профили деформации  $\varepsilon_{zz}$ , полученные вдоль вертикальной линии, проходящей через вершину КТ, демонстрируют очень хорошее соответствие между экспериментом (рис. 2.9(d), синяя линия) и моделью (рис. 2.9 (d), красная линия). Отметим, что, в отличие от [Cherkashin, 2013], мы получили профиль деформации прямо из модели, не изменяя его с учетом экспериментального пространственного разрешения. Видно, что субнанометровое пространственное разрешение оказывает небольшое влияние на полученные таким образом карты деформаций.

Геометрические параметры были получены при помощи ПЭМ, а затем использованы для расчёта упругих полей референтной КТ InGaAs методом конечных разностей. Референтная КТ имеет форму пирамиды высотой  $H = 9$  нм и с квадратным основанием с длиной стороны  $L = 28$  нм, которые ориентированы параллельно направлениям  $\langle 010 \rangle$  в плоскости (001). Пирамида ограничена плоскостями  $\{203\}$  с ребрами  $\langle 332 \rangle$ . Экспериментально определенное распределение индия  $C_{QD}^{In}(x, y, z)$  в КТ аналитически аппроксимируется следующим образом:

$$C_{QD}^{In}(x, y, z) = C_{base}^{In} + [f_{facet}^{In}(z) - C_{base}^{In}] \frac{z}{L/\sqrt{2} - x - y} \frac{L}{\sqrt{2}H}, \quad (2.11)$$

где начало координат (0,0,0) расположено в центре основания КТ, а

$$f_{facet}^{In}(z) = C_{facet}^{In} + (1 - C_{facet}^{In}) \sqrt{z/H} \quad (2.12)$$

определяет распределение индия по граням. Константы  $C_{facet}^{In} = 0.25 \pm 0.06$  и  $C_{base}^{In} = 0.40 \pm 0.06$  обозначают концентрацию индия в гранях и основании референтной КТ при  $z = 0$ .

Из-за стохастического характера самоорганизации КТ InGaAs различные КТ в ансамбле незначительно отличаются друг от друга по размерам и другим параметрам. Распределение размеров по длине основания и высоте всего массива КТ обычно близко к нормальному [Ebiko, 1998]. Однако эти величины зависят друг от друга – чем больше КТ, тем она выше. В результате соотношение сторон референтной КТ характерно для всего массива КТ. Несмотря на большую дисперсию размеров, трехмерное распределение индия внутри КТ вряд ли будет отличаться у различных КТ. Действительно, речь идет об условиях зародивания КТ, которые одинаково сказываются на всём ансамбле КТ чистого InAs, сформировавшихся изначально разного размера, но одинаковой формы.

В процессе зародивания КТ InAs слоем GaAs, происходит сегрегация индия и минимизация упругой энергии КТ. В результате такого процесса феноменологически сгенерированное распределение индия можно

рассматривать как трехмерное расширение модели сегрегации Мураки. В подтверждение этого аргумента было обнаружено, что аналогичное описание трехмерного распределения состава точно описывает множество систем, включая островки SiGe [Cherkashin, 2017]. Диапазон стандартных погрешностей параметров модели МКР хорошо соответствует стандартному отклонению параметров экспериментальных КТ. Соответственно, допустимо предположить, что данные, собранные из нескольких КТ, которые были подтверждены моделью МКР, характерны для большинства КТ в массиве.

Мы также учитываем смачивающий слой InGaAs, который хорошо виден на изображениях ПЭМ, и на карте  $\varepsilon_{zz}$  составляющей тензора деформации (рис. 2.7(b)). Из-за сегрегации и перемешивания индия распределение индия в смачивающем слое не является тривиальным. Его можно аппроксимировать следующим аналитическим выражением [Cherkashin, 2013]:

$$f_{wL}^{\text{In}}(z) = \frac{A}{zB\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\ln z - \mu)^2}{2B^2}\right], \quad (2.13)$$

где константы  $A = 0.69$ ,  $B = 0.70$  и  $\mu = 1.25$  определены при помощи аппроксимации экспериментальных данных [Cherkashin, 2013].

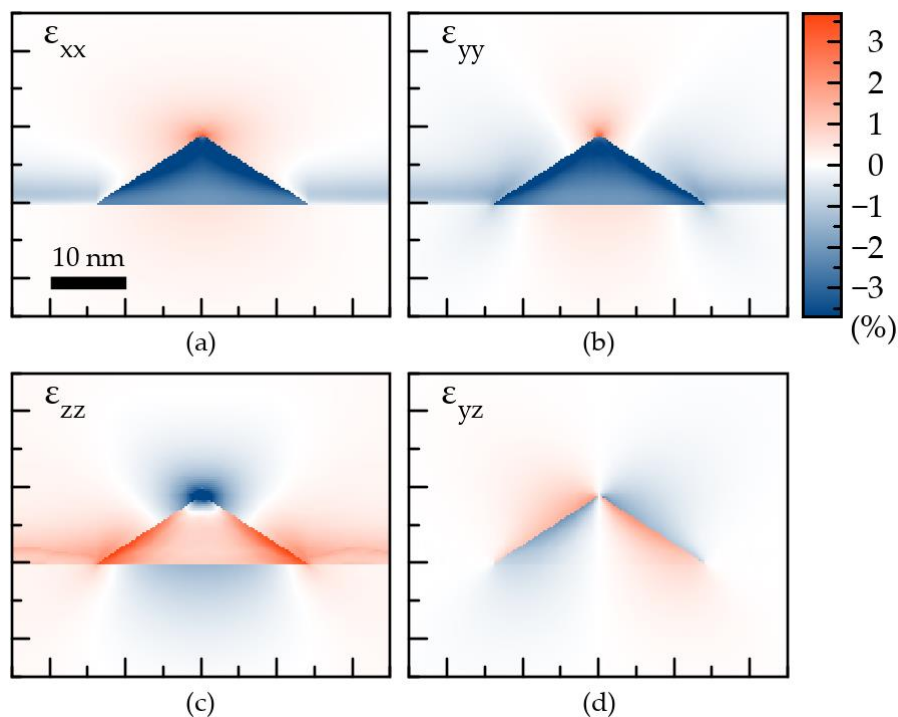
С рассчитанным полем механических напряжений-деформаций решена задача квантовой механики для электронов и дырок на одной и той же конечно-разностной сетке в однозонном приближении. Мы сосредоточимся исключительно на основном состоянии электронов и дырок, локализованных в КТ. Никаких явлений, связанных со смешиванием зон, мы не исследуем, так как оно не присуще однозонной модели. Мы также учитываем, что основное состояние дырок в пирамидальной КТ InGaAs состоит преимущественно из тяжелых дырок. Модель была верифицирована сравнением с результатами расчетов восьмизонной  $k \cdot p$ -модели, полученных в [Stier, 1999] для случая КТ InAs пирамидальной формы.

### Полученные результаты

На рис. 2.10 представлены компоненты тензора упругих деформаций, рассчитанные для референтных пирамидальных КТ с тем же соотношением высоты к длине основания и функциональным распределением In, которые задаются уравнениями (2.11)–(2.13). Геометрические параметры и химический состав КТ точно соответствуют референтным значениям.

$\varepsilon_{xx}$  и  $\varepsilon_{yy}$  отрицательны во всем поперечном сечении, что является результатом того, что постоянная решётки подложки GaAs меньше постоянной решетки InGaAs (см. табл. 2.1). Из-за положительного коэффициента Пуассона  $\varepsilon_{zz}$  положительна. Ближе к вершине деформация становится более

гидростатической по причине геометрии. Более высокая концентрация индия вблизи граней приводит к большей упругой деформации по сравнению с внутренней частью КТ. Поверхности также создают значительную сдвиговую составляющую  $\epsilon_{yz}$ . Этот компонент кажется усиленным из-за неравномерного распределения In, если мы сравним результаты, представленные на Рис. 2.10, с аналогичными расчетами, представленными в [A4]. Сравнение нескольких КТ с разными параметрами показывает, что карты упругих деформаций очень похожи как в качественном, так и в количественном отношении.



**Рис. 2.10.** Компоненты упругой деформации, рассчитанные с помощью МКР. Поперечное сечение референтной КТ InGaAs сделано плоскостью ZY, проходящей через ось симметрии пирамид. Показана центральная часть ячейки. Параметры КТ:  $L = 28$  нм,  $H = 9$  нм,  $C_{base}^{In} = 0.40$ ,  $C_{facet}^{In} = 0.25$ .

Смачивающий слой InGaAs включается в расчет в соответствии с уравнением (2.13). Благодаря относительно низкому содержанию индия, смачивающий слой создает относительно слабое упругое тетрагональное растяжение. В выбранной геометрии он не вызывает напряжения сдвига.

Неравномерное распределение In и поля деформации-напряжения приводят к специфическому профилю локализирующего потенциала для электронов и дырок, который определяется суммой различных по природе вкладов. Один из них напрямую связан с зависимостью ширины запрещенной зоны от состава, которая представлена в таблице 2.1. Мы предполагаем, что разрывы зон

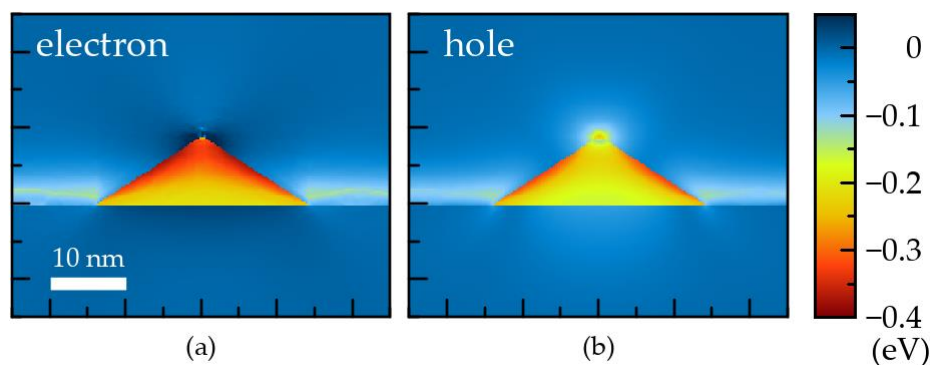
составляют 0.8 для электронов и 0.2 для дырок. Сжимающая гидростатическая деформация увеличивает электронный потенциал в КТ как:

$$\delta E_e = a_c tr(\varepsilon), \quad (2.14)$$

где деформационный потенциал  $a_c$  отрицателен. Валентная зона чувствительна ко всем компонентам тензора деформации. Сжимающая гидростатическая составляющая тензора деформаций снижает локализирующий потенциал, девиаторная и сдвиговая составляющие тензора расщепляют зоны тяжелых и легких дырок. Это расщепление в центре зоны Бриллюэна можно описать как [Bir, 1974]:

$$\delta E_h = a_h tr(\varepsilon) \pm \sqrt{b^2 \left[ (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})^2 + (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{yy})^2 \right] / 2 + d^2 (\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2)} \quad (2.15)$$

Параметры деформационного потенциала дырок приведены в табл. 2.1.

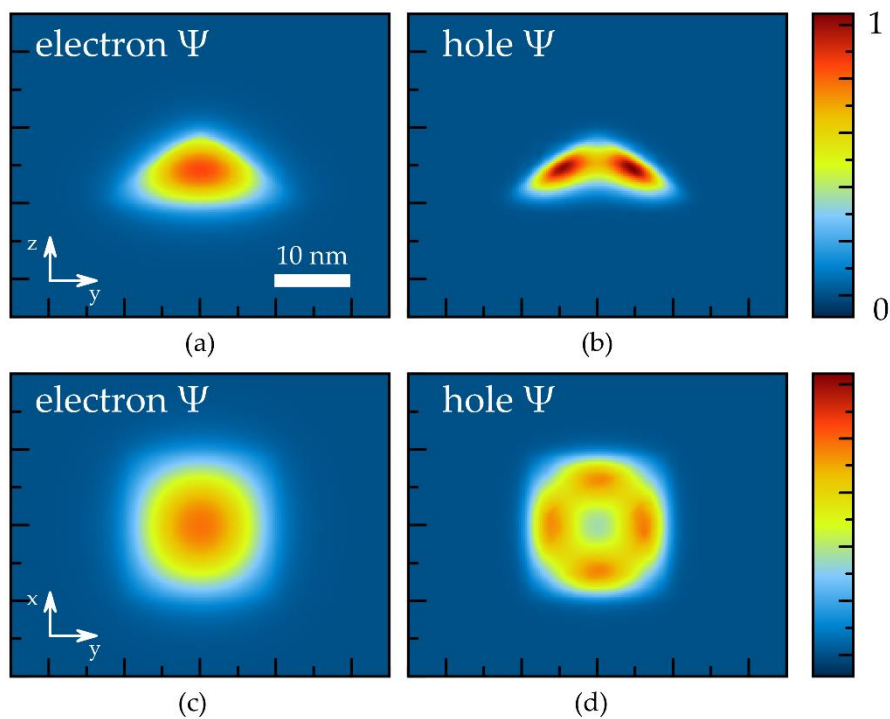


**Рис. 2.11.** Локализирующие потенциалы для (a) электронов и (b) дырок. Сечение референтной КТ InGaAs сделано плоскостью ZY, проходящей через ось симметрии пирамиды.

Двумерные распределения локализирующих потенциалов для электронов и дырок в референтной КТ приведены на рис. 2.11. Для электронов наиболее глубокий потенциал находится вблизи граней в их середине и в верхней части объема КТ. Для дырок локализирующий потенциал еще больше сконцентрирован вблизи граней КТ. Пьезоэлектрическое поле снижает симметрию локализирующего потенциала с  $C_{4v}$  до  $C_{2v}$ . Наши расчеты показывают, что вклад пьезоэлектричества в локализирующий потенциал мал по сравнению с химическим вкладом и вкладом деформации. Пьезоэлектрический эффект создаёт вокруг КТ окуполь, который, в первую очередь, изменяет форму волновой функции. В данной работе им пренебрегли, как и в более ранних работах [A4; Stier, 1999].



Определенные локализирующие потенциалы используются в квантово-механических задачах, которые решаются отдельно для электронов и дырок. Волновые функции основного состояния электрона и дырки в КТ представлены на рис. 2.12.



**Рис. 2.12.** Волновые функции основных состояний электронов (a, c) и дырок (b, d). Сечение референтной КТ InGaAs выполнено: (a, b) плоскостью ZY, проходящей через ось симметрии пирамид. (c, d) плоскость XY, проходящая на 3 нм выше границы раздела.

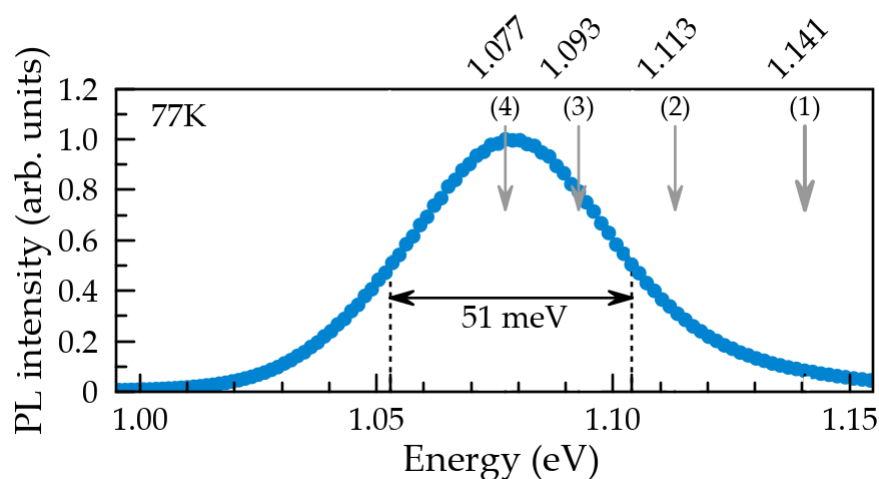
Хотя локализирующий потенциал глубже вблизи граней КТ, волновая функция электрона проявляется в объеме КТ с наибольшим значением почти в середине оси симметрии. Это связано с относительно небольшой эффективной массой электронов. Эффективная масса тяжелых дырок существенно больше (табл. 2.1), поэтому волновая функция дырки оказывается более чувствительной к профилю потенциала. Максимум волновой функции дырки основного состояния не находится в центре КТ, в отличие от волновой функции электрона, а распределяется скорее бубликом. Тем не менее, она остается существенной вблизи центра КТ. Интеграл перекрытия для основного состояния электрона и дырки оказывается равным 0.8, т. е. достаточно большим.

### Обсуждение

Описанные выше результаты моделирования основаны исключительно на структурных данных, полученных экспериментально для КТ InGaAs, сформированных по общепринятой технологической схеме в процессе МЛЭ.

Таким образом, модель не опирается на какие-либо подгоночные параметры и использует стандартный набор параметров материалов, перечисленных в табл. 2.1. Имеет смысл сравнить результаты расчетов с экспериментальным спектром оптического излучения КТ. В случае фотолюминесценции, регистрируемой при низкой температуре, оптическое излучение в основном связано с излучательной рекомбинацией экситонов, образованных электронами и дырками в основных состояниях в КТ. Энергия связи экситона зависит от многих параметров КТ, но может быть грубо оценена как 10 мэВ.

На рис. 2.13 показан экспериментальный спектр ФЛ КТ InGaAs, измеренный при 77 К. Важно подчеркнуть, что структурные и оптические исследования проводились на одном и том же образце. Детали технологии выращивания этого образца можно найти в [Cherkashin, 2013].



**Рис. 2.13.** Экспериментальный спектр фотолюминесценции, зарегистрированный при 77 К, от ансамбля КТ InGaAs. Вертикальными стрелками отмечено излучение экситонов из КТ со следующими параметрами:

- (1)  $L=28\text{nm}$ ,  $H=9\text{nm}$ ,  $C_{base}^{In}=0.40$ ,  $C_{facet}^{In}=0.25$ ;
- (2)  $L=30\text{nm}$ ,  $H=10\text{nm}$ ,  $C_{base}^{In}=0.45$ ,  $C_{facet}^{In}=0.30$ ;
- (3)  $L=34\text{nm}$ ,  $H=11\text{nm}$ ,  $C_{base}^{In}=0.45$ ,  $C_{facet}^{In}=0.30$ ;
- (4)  $L=34\text{nm}$ ,  $H=11\text{nm}$ ,  $C_{base}^{In}=0.50$ ,  $C_{facet}^{In}=0.35$ .

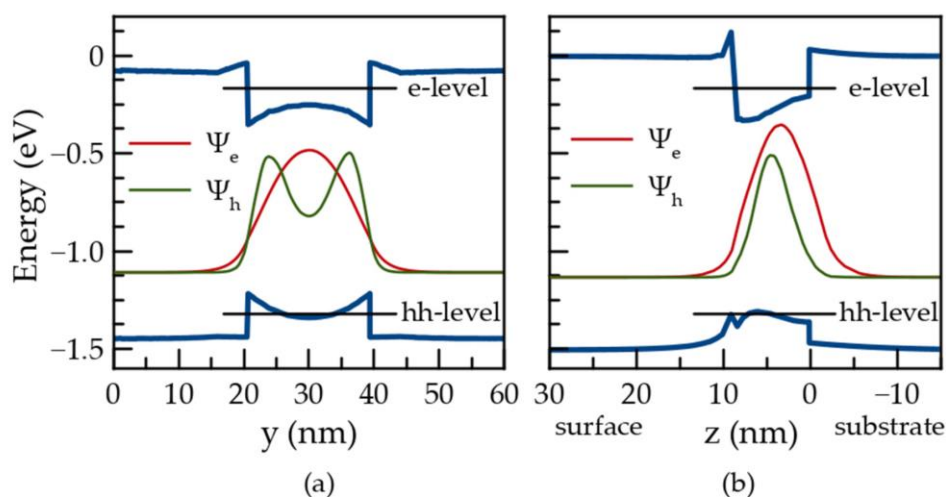
Экситонное излучение одиночной КТ дает резкую линию в оптическом спектре. К сожалению, технически невозможно зарегистрировать оптическую линию и

исследовать структуру для одной и той же КТ, таким образом мы вынуждены сравнивать микроскопическое исследование единичной КТ с излучением их ансамбля. Из-за спонтанного стохастического характера самоорганизации разные КТ в ансамбле имеют несколько разные параметры, а именно, объем КТ, форма и общее содержание индия. Дисперсия параметров КТ приводит к неоднородному уширению полосы ФЛ.

Вертикальные стрелки на рис. 2.13 указывают рассчитанные энергии экситонов в основных состояниях для КТ InGaAs с различными параметрами. Референтная КТ (линия 1), по-видимому, находится на высокоэнергетической стороне полосы. При сохранении распределения индия (уравнения (2.3) и (2.4)) и соотношения сторон пирамиды красное смещение излучения может быть обеспечено несколько большим общим содержанием In и некоторым увеличением объема КТ. Линии (2), (3) и (4) показывают влияние этих параметров на энергию фотона. Максимум экспериментальной полосы ФЛ соответствует пирамидальной КТ с основанием 34 нм, высотой 11 нм и концентрацией индия, описываемой уравнениями (2.11) и (2.12) с параметрами  $C_{base}^{In} = 0.50$ ,  $C_{facet}^{In} = 0.35$ . Так что отклонения параметров от референтной КТ вполне разумны. Фактически дисперсия линейных размеров КТ InGaAs обычно составляет от 10 до 20% [Ruvimov, 1995]. Такая дисперсия масштабируется в широком диапазоне плотностей КТ и других характеристик ансамбля КТ [Ebiko, 1998].

Расчеты МКР, включающие задачи упругости и квантовой механики, ранее применялись для описания собственных состояний электронов и дырок в самоорганизующихся эпитаксиальных КТ InGaAs переменной формы и в различных средах [Grundmann, 1995; A4; Stier, 1999; A2]. В таких расчетах концентрация индия,  $C_{QD}^{In}$ , обычно считается равномерно распределенной, и ее значение считается подгоночным параметром. Это предположение явно противоречит структурным данным (см. рис. 2.9 и данные в [Sautter, 2020; Cherkashin, 2013]). Это также приводит к неточным предсказаниям волновых функций основного состояния. На самом деле, однородное распределение индия в плоскости всегда приводит к локализации максимума волновых функций вблизи центра КТ как для основного состояния электрона, так и для дырки [Grundmann, 1995; Stier, 1999]. На рис. 2.12 видно, что такая форма волновой функции действительно имеет место быть в случае основного состояния электрона, но не основного состояния дырки. На рис. 2.14 в плоскости и по оси  $z$  показаны локализирующие потенциалы электронов и дырок, а также соответствующие волновые функции для основных состояний. Черные линии показывают энергию основных состояний электронов и дырок. Видно, что энергия размерного квантования электрона существенно выше любого подъема

потенциала в пределах референтной КТ. Однако в случае дырок энергия размерного квантования меньше из-за большей эффективной массы (см. табл. 2.1). В результате дырка в основном состоянии сталкивается с барьерами, находящимися внутри КТ. Следовательно, плоскостное сечение волновой функции дырки на рисунке 2.14 имеет два максимума, которые являются срезом бублика на рисунке 2.12.



**Рис. 2.14.** Локализирующие потенциалы для электронов и дырок (синие сплошные линии), волновые функции электронов и дырок (красные и зеленые линии, соответственно) и основные уровни электронов и дырок, локализованных в КТ (черные линии). Данные нанесены вдоль: (a) оси  $Y$ , проходящей на 3 нм выше границы раздела; (b) ось  $z$ , проходящая через центр пирамиды.

В этом разделе мы обсуждаем исключительно основные состояния. Однако ясно, что энергия возбужденного состояния дырки выше и, следовательно, менее чувствительна к профилю потенциала. Кроме того, из-за симметрии волновая функция во втором состоянии должна иметь узел вблизи центра КТ. В результате форма волновой функции возбуждённых состояний дырки должна быть гораздо менее чувствительна к неоднородному распределению индия. Таким образом, он должен приближаться к предсказаниям, представленным в [Stier, 1999]. Энергия электрона сильно выше квантующего потенциала даже в основном состоянии, но его наклон приводит к небольшому смещению максимума в сторону вершины пирамиды.

Необычная форма бублика волновой функции дырки в основном состоянии важна для многих применений. Например, интеграл перекрытия основного состояния электрона и дырки равен 0.8 в референтной КТ InGaAs и уменьшается с увеличением её размера. Это означает, что более крупные КТ InGaAs обладают существенно меньшими скоростями излучательного распада и экситонного

поглощения на основных уровнях. Это явление необходимо учитывать при разработке лазеров на основе КТ, светодиодов, солнечных элементов и других оптических и оптоэлектронных устройств.

Форма бублика волновой функции дырки также должна влиять на магнитные свойства, такие как  $g$ -фактор, и должна приводить к определенной анизотропии. В частности, определенное распределение плотностей электронов и дырок приводит к встроенному дипольному моменту. Расчеты для однородного распределения индия предсказывают, что локализация волновой функции дырки находится ниже волновой функции электрона в направлении роста [Fry, 2000]. Постепенное уменьшение концентрации индия от основания к вершине приводит к противоположному знаку дипольного момента [Fry, 2000]. Наша экспериментально-верифицированная модель с увеличением концентрации индия от основания к вершине и от середины к граням пирамиды приводит к почти нулевому встроенному постоянному дипольному моменту.

## Заключение

Результаты моделирования эпитаксиальных самоорганизованных КТ InGaAs показали, что точные структурные данные хорошо согласуются со спектрами оптического излучения, зарегистрированными для того же образца. Используемая модель, будучи количественно точной в расчетах энергии основного состояния электрона и дырки, предсказывает необычную бубликоподобную форму волновой функции дырки. Это должно приводить к уменьшению интеграла перекрытия волновых функций электрона и тяжелой дырки и, как следствие, к изменению оптических и магнитных свойств таких КТ.

На основании результатов этой главы были сформулированы следующие положения, выносимые на защиту:

1. В пирамидальных квантовых точках зависимость глубины локализации носителей заряда от отношения высоты к основанию имеет экстремум, обусловленный влиянием на локализирующий потенциал гидростатической, девиаторной и сдвиговой компоненты тензора упругой деформации, а также эффектом размерного квантования. В системе пирамидальных квантовых точек InAs в GaAs минимальная энергия электронно-дырочных пар достигается при отношении высоты к основанию  $\approx 0.2$ .
2. Квантовые точки InAs, помещенные в квантовую яму InGaAs, обладают большей глубиной локализации носителей по сравнению с аналогичными квантовыми точками в объеме GaAs благодаря

совместному действию *трёх* механизмов: увеличению объема квантовой точки, перераспределению упругих деформаций, и изменению отношения длины основания пирамидальной квантовой точки к её высоте. Требование когерентности интерфейсов ограничивает предельную глубину локализации.

### Глава 3. Управление люминесцентными свойствами КТ InAs с помощью плазмонных частиц

Самоорганизованные полупроводниковые КТ могут повысить производительность различных современных оптоэлектронных устройств, таких как лазеры, светодиоды, солнечные элементы, ячейки памяти и т. д. [Ledentsov, 2010; Marent, 2010; Wu, 2015; Zhou, 2016]. Преимущество КТ заключается в сильной трехмерной локализации электронов и дырок, что предотвращает безызлучательную рекомбинацию носителей. Несмотря на высокий квантовый выход и высокую плотность состояний в квантовых точках, они относительно слабо взаимодействуют со светом. Время излучательной рекомбинации экситонов, локализованных в КТ, велико и может достигать 1 нс [Salewski, 2017], а время затухания когерентности для КТ InGaAs составило 0.75 нс. [A5].

В этой главе мы исследуем особенности взаимодействия экситонов, локализованных в КТ, со светом, возникающие при пространственном совмещении КТ с металлическими наночастицами в ближнем поле. Такие частицы могут, например, выступать в роли антенны и концентрировать электрическое поле. Такой подход был продемонстрирован для коллоидных КТ [Govorov, 2006], но мало изучался в системах эпитаксиальных КТ [Lyamkina, 2014].

Взаимодействие КТ и металлических наночастиц может происходить за счёт различных механизмов: эффект Парселла, механизм Фёрстера, «затенение» квантовой точки металлической частицей, туннелирование носителей из КТ и последующая рекомбинация в металле и прочие. Какой механизм будет задействован в конкретном случае зависит от особенностей реализации системы, в частности, от выбранной системы материалов и от её режимов роста, а соответственно и полученной геометрии.

В работе [Lyamkina, 2014] рассматривались КТ InGaAs вблизи поверхности, на которой были сформированы наночастицы In. В свою очередь, в этом разделе мы исследуем два набора аналогичных структур, реализованных в другой системе материалов. Объектами исследований являются КТ InGaAs. В первом разделе главы рассматриваются гибридные структуры, в которых сначала формировались слои КТ InGaAs, а затем наращивался слой GaAs при низкой температуре, в котором путем отжига формировались металлические наночастицы As. Во втором разделе главы рассматриваются аналогичные КТ, сформированные вблизи поверхности, на которую наносилась тонкая плёнка Ag. После отжига плёнка распадалась на отдельные островки с таким размером,

чтобы энергия локализованного плазмонного резонанса спектрально соответствовала полосе излучения КТ InGaAs. В целом глава посвящена определению механизмов взаимодействия между КТ и металлическими наночастицами в таких системах.

### 3.1 Фотолюминесценция из квантовых точек InAs в GaAs, выращенных слоем GaAs при пониженной температуре

#### Введение

КТ InGaAs, выращенные методом МЛЭ, в объеме GaAs могут демонстрировать большое время рекомбинации экситонов и дефазировки спинов. С другой стороны GaAs, выращенный при низкой температуре, обладает чрезвычайно короткими временами жизни неравновесных носителей заряда [Gupta, 1991; Pastor, 2012; Pastor, 2013], благодаря чему обладает возможность быстрого переключения. В таком материале большое количество избыточного мышьяка внедряется в растущую пленку в виде антиструктурных дефектов  $As_{Ga}$ , которые могут быть преобразованы в систему самоорганизованных нановключений путем постростового отжига [Bert, 1993; Melloch, 1995; Chaldyshev, 2002].

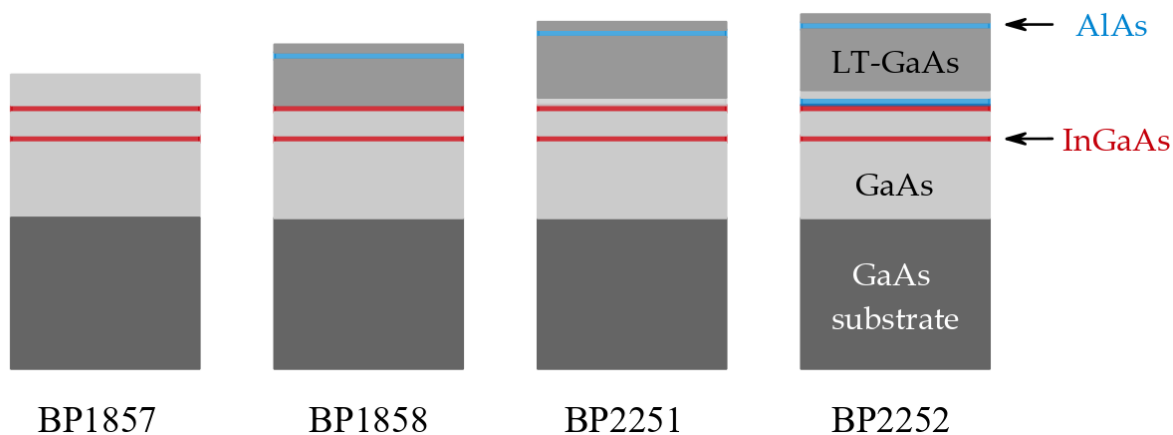
Комбинация КТ InGaAs, полученных в режиме роста Странского-Крастанова, со слоями LT-GaAs, в рамках одного и того же ростового процесса МЛЭ, является важным шагом к применению сложных устройств, использующих как эффективность излучения, так и длительное время жизни носителей в КТ InGaAs и возможность быстрого переключения LT-GaAs. Осуществимость роста такой структуры была доказана в статье [Nevedomskii, 2009]. Также были выявлены проблемы с образованием дефектов в таких структурах [Nevedomskii, 2009; Nevedomskii, 2013], что привело к ослаблению ФЛ от таких КТ InGaAs [A10].

Таким образом, в этом разделе мы проводим комплексный анализ структурных и оптических параметров структур, в которых КТ InGaAs были выращены слоем LT-GaAs и анализируем причины изменения оптических свойств. Мы показываем, что ФЛ от КТ InGaAs критически зависит от типа и толщины буферного слоя между массивом КТ InGaAs и LT-GaAs. Двойная роль буфера заключается в устранении дефектов при низкотемпературном выращивании и управлении туннелированием электронов из квантовых состояний в КТ InGaAs в континуум состояний в LT-GaAs, где они могут быстро рекомбинировать. Разработана и проверена микроскопическая модель для количественного описания оптических свойств структур.



## Образцы

Схема образцов представлена на рис. 3.1. Образцы выращены<sup>2</sup> в ростовой установке МЛЭ «Катунь» на полуизолирующих подложках GaAs с ориентацией (001). В качестве начального этапа был выращен слой GaAs толщиной 200 нм при температуре 580 °С со скоростью роста 1 мкм ч<sup>-1</sup>.



*Рис. 3.1. Схематическое изображение образцов BP1857, BP1858, BP2251, BP2252*

Для формирования массива КТ были нанесены три монослоя (МС) InAs при температуре 460 °С и скорости осаждения 0.05 МС с<sup>-1</sup>. Массив КТ был выращен GaAs толщиной 10 нм, затем ещё один слой КТ был сформирован аналогичным образом. Расстояние между слоями КТ в направлении роста достаточно мало, чтобы обеспечить корреляции между положениями КТ в верхнем и нижнем слоях и эффективной связи электронных состояний в каждой паре КТ [Mazur, 2002]. КТ во всех образцах в этой работе имеют одинаковую конфигурацию и отличаются только последующими слоями.

Референтный образец BP1857 имеет два слоя КТ InAs, выращенных слоем GaAs толщиной 30 нм при температуре 460 °С. В образце BP1858 два слоя КТ, сформированных при 460 °С, зарастивали слоем LT-GaAs толщиной 30 нм при температуре около 150 °С, за которым следовали закрывающие слои AlAs толщиной 5 нм и GaAs толщиной 5 нм. Слой AlAs выращен для предотвращения диффузии мышьяка во время постростовых отжигов, а GaAs необходим для защиты самого AlAs от окисления.

В образце BP2251 аналогичные слои КТ InAs сначала зарастивались буферным слоем GaAs толщиной 5 нм при 460 °С, и только потом температура подложки снижалась примерно до 200 °С и выращивался слой LT-GaAs толщиной 100 нм. Затем, аналогично структуре BP1858, выращивался закрывающий слой.

<sup>2</sup> Мы благодарим за выращивание образцов В.В. Преображенского, М.А. Путьто и Б.Р. Семягина из института физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук

Образец BP2252 отличается от предыдущего только структурой буферного слоя, представляющего собой комбинацию AlAs толщиной 2.5 нм и GaAs толщиной 3 нм. Более подробная информация о процедуре выращивания и его мониторинге описана в работах [Nevedomskii, 2009; Nevedomskii, 2011; Nevedomskii, 2013]. Образцы, содержащие LT-GaAs, были разделены на несколько частей, некоторые из них были отожжены. Однако, в рамках этой работы влияние отжига на оптические свойства LT-GaAs мы не рассматриваем, концентрируясь на влиянии этого слоя на оптические свойства КТ InAs.

### Экспериментальные методы

Для детальной структурной характеристики образцов были проведены исследования<sup>3</sup> методом ПЭМ на приборе JEOL JEM2100F с ускоряющим напряжением 200 кВ. Образцы готовили при помощи механической полировки с последующим выравниванием поверхности ионами Ar<sup>+</sup> с энергией ионов 2–4 кэВ и углом падения 11°.

Для измерения ФЛ при 77 К образцы помещались в криостат, где они находились в резервуаре с жидким азотом. ФЛ возбуждалась термостабилизированным непрерывным полупроводниковым лазером THORLABS с длиной волны 660 нм. Держатель образцов располагался в фокальной плоскости монохроматора ЛОМО СДЛ-1. Монохроматор использовал дифракционную решетку с разрешением 300 штрихов на мм, рабочие длины волн которой составляли 800–2000 нм. В качестве фотоприемника использовался фотодиод Ge ФД-10ГА, охлаждаемый жидким азотом. Сигнал фотодиода регистрировался синхронным детектором Anfatec при модуляции лазерного луча на частоте 320 Гц.

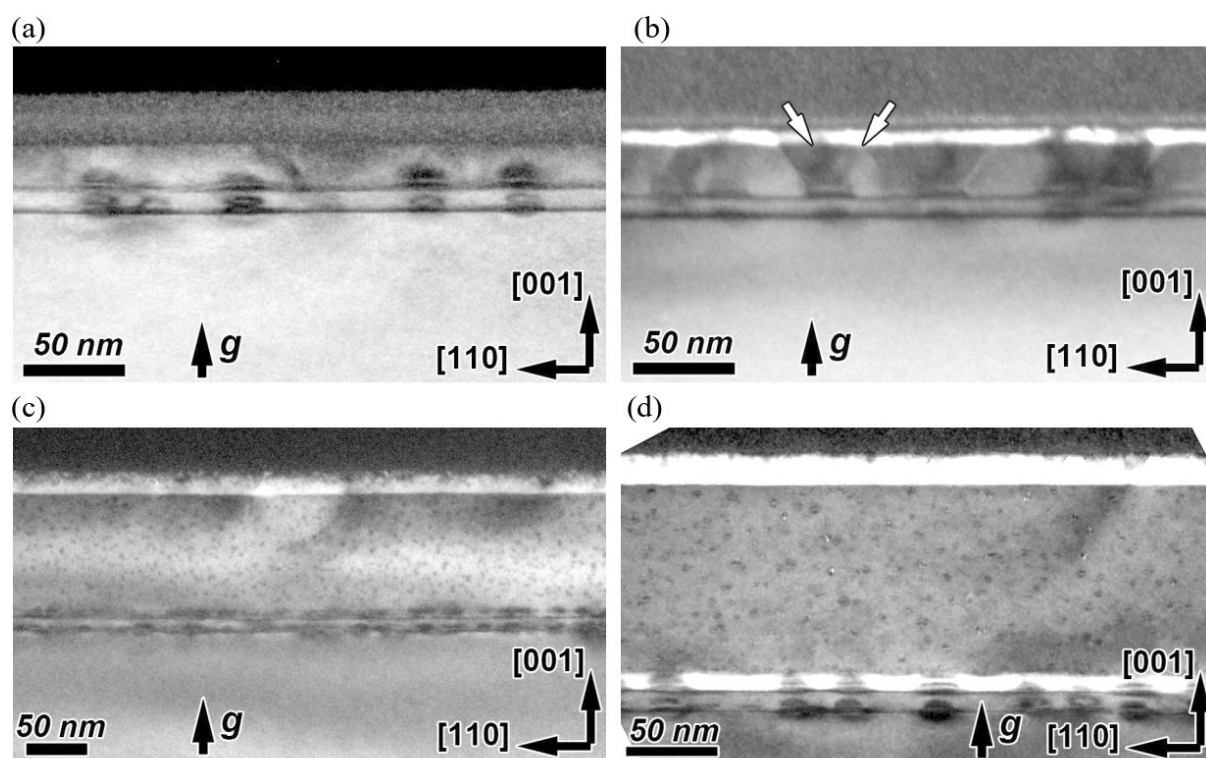
Спектры оптического пропускания и отражения регистрировали при комнатной температуре. В качестве источника света использовалась лампа Osram HLX 100W 6.6A с коллиматором. Оптические спектры регистрировались спектрометром OceanOptics NIR Quest-512, оснащенный охлаждаемым линейным фотодетектором Hamamatsu InGaAs, чувствительным в диапазоне длин волн от 900 до 1700 нм. Мы использовали программное обеспечение SpectraSuite от OceanOptics для управления спектрометром. На том же оборудовании изучали температурную зависимость ФЛ. Для этого образцы устанавливали в криостат погружного типа, где образец находился в парах жидкого азота.

---

<sup>3</sup> Мы благодарны за проведение микроскопических исследований В.Н. Неведомскому и Н.А. Берту из ФТИ им. А.Ф. Иоффе

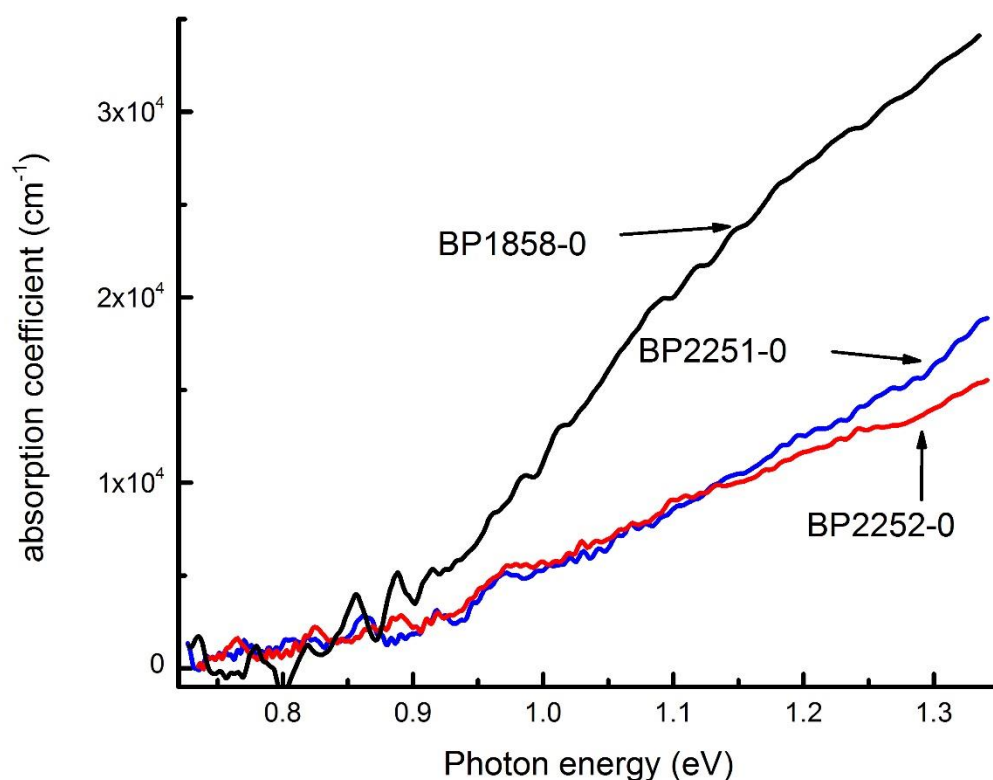
## Результаты

На рис. 3.2 представлены электронно-микроскопические изображения образцов в поперечном сечении, полученные при помощи ПЭМ. На изображении (a) референтного образца отчетливо видны два смачивающих слоя InGaAs с КТ, окруженные дополнительным темным контрастом из-за локального смещения атомов в барьерах GaAs. В результате локальных полей деформации и напряжений КТ InGaAs образуют вертикально сопряженные пары. ПЭМ не выявила дислокаций или других дефектов в этом образце. Аналогичные пары КТ InGaAs присутствуют на микрофотографиях для всех образцов. Когда использовался слой LT-GaAs, он заращивался комбинацией из AlAs/GaAs, хорошо заметных на изображениях (b), (c) и (d) из-за яркого контраста, связанного с AlAs. В случае образца BP1858 в LT-GaAs между верхним слоем КТ и закрывающим слоем AlAs наблюдается большое количество V-образных дефектов, которые обычно состоят из двух пар дислокаций, распространяющихся в разных плоскостях (111) от КТ к поверхности [Sears, 2006]. Таких дефектов нет в BP2251 и они редки в BP2252.



**Рис. 3.2** Просвечивающие электронные микрофотографии поперечного сечения. (a) BP1857, темное поле; (b) BP1858, темное поле, один из V-образных дефектов указан стрелкой; (c) BP2251, темное поле; (d) BP2252, светлое поле. Образцы BP1857 и BP1858 выращены, образцы BP2251 и BP2252 отожжены при 600°C.  $g = 002$ .

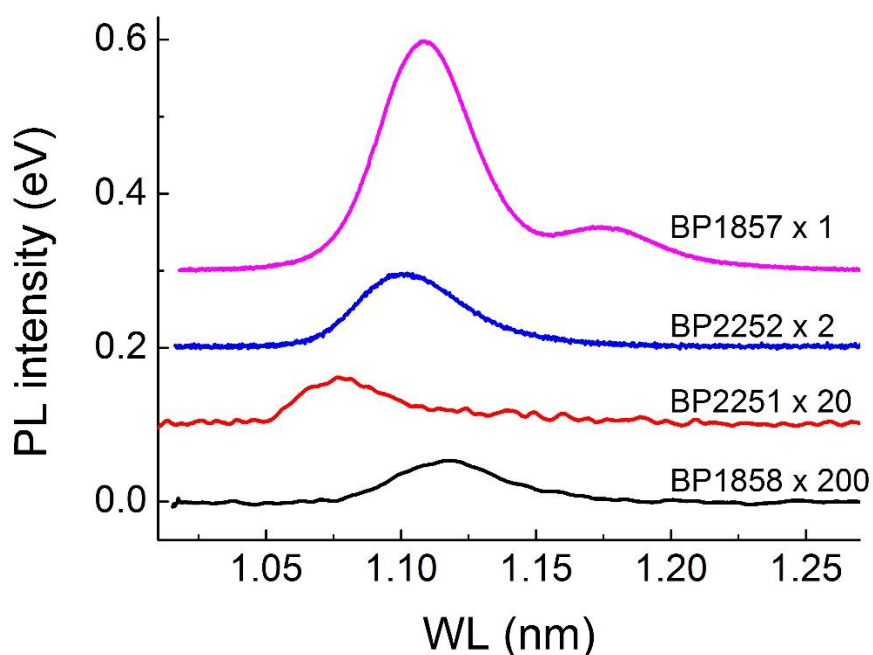
Измерения оптического пропускания и отражения показали значительное поглощение ассоциированное с LT-GaAs во всех образцах, содержащих его неотожженные слои. Спектры оптического поглощения показаны на рис. 3.3 для ближней инфракрасной области от 0.8 до 1.4 эВ. Характерный порог и форма спектров поглощения указывают на то, что в неотожженных образцах поглощение связано с дефектами замещения мышьяка  $As_{Ga}$ , появившимися в пленке GaAs в процессе МЛЭ при пониженной температуре [Bert, 1993; Melloch, 1995; Chaldyshev, 2002; Streb, 1996]. При использовании калибровки из работы [Martin, 1981], концентрация дефектов оказывается равной  $1.8 \times 10^{20}$ ,  $8.8 \times 10^{19}$  и  $8.1 \times 10^{19}$   $cm^{-3}$  в слоях LT-GaAs BP1858, BP2251 и BP2252, соответственно. Эти значения соответствуют температурам роста около 150 °C в случае BP1858 и около 200 °C в случаях BP2251 и BP2252 [Liu, 1995]. КТ InGaAs, по-видимому, вносят незначительный вклад в общее поглощение инфракрасного света по сравнению с дефектами  $As_{Ga}$  в LT-GaAs.



**Рис. 3.3.** Оптическое поглощение в ближней инфракрасной области в различных образцах, содержащих слои LT-GaAs.

На рис. 3.4 представлены спектры ФЛ всех выращенных образцов в области энергий фотонов оптического излучения КТ InAs. На основании данных ПЭМ (рис. 3.2) мы ожидаем, что электронные состояния в вертикальных парах КТ

связаны так, что излучение происходит из состояния с наименьшей энергией в каждой паре. Известно [Xie, 1995], что размер КТ незначительно увеличивается в каждом следующем слое, сопряженном с предыдущим. В таком случае ФЛ возникает от экситонных состояний, преимущественно локализованных в верхнем слое КТ. Верхняя кривая на Рис. 3.4 представляет спектр ФЛ референтного образца BP1857, где массивы КТ выращены при обычной температуре. Он имеет максимальную интенсивность при 1.109 эВ. Полная ширина на полувысоте (full width at the half maximum - FWHM) составляет 40 мэВ, а интегральная яркость (FWHM, умноженная на пиковую интенсивность) составляет 23.8 тысяч относительных единиц. Основная полоса соответствует излучательной рекомбинации электронов и тяжелых дырок, локализованных в КТ InGaAs. Ширина полосы отражает неоднородное уширение из-за дисперсии размеров КТ в массиве. Основная полоса имеет плечо со стороны высоких энергий, которое мы связываем с излучением возбужденных состояний в парах КТ.



**Рис. 3.4.** Спектры ФЛ выращенных образцов с двумя слоями КТ InAs. Для лучшей наглядности спектры строятся с разными коэффициентами умножения и разными вертикальными сдвигами.

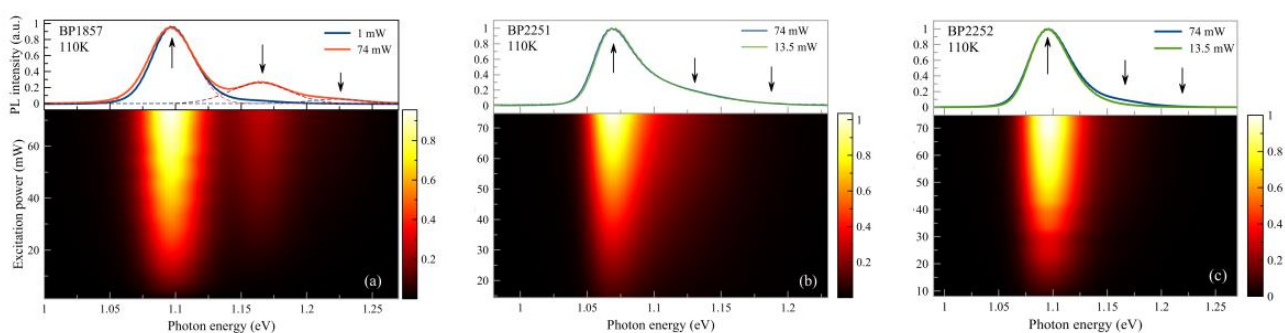
Самая нижняя кривая на рис. 3.4 — это спектр ФЛ образца BP1858, где КТ InGaAs непосредственно выращены LT-GaAs без какого-либо буферного слоя. Сигнал ФЛ этого образца самый слабый среди всех остальных. Интегральная яркость 45 отн. ед., что в почти 500 раз ниже аналогичного значения для референтного

образца. Максимум основного пика приходится на энергии 1.117 эВ, а FWHM 42 мэВ. Эти значения очень близки к значениям референтного образца.

Образец BP2251 с буферным слоем GaAs между КТ и LT-GaAs показывает большую интенсивность ФЛ по сравнению с образцом BP1858, но его интегральная яркость ФЛ равна 244 отн. ед., что в примерно 100 раз ниже, чем у референтного образца BP1857. Максимальная энергия ФЛ смещена в красную область до 1.075 эВ относительно референтного образца, а FWHM составляет 40 мэВ.

Образец BP2252 с буферным слоем AlAs/GaAs между КТ и слоями LT-GaAs демонстрирует дальнейшее улучшение интенсивности ФЛ. Интегральная яркость ФЛ составляет 4300 отн. ед. и остается в 5.5 раза слабее референтного образца. Максимум ФЛ находится на уровне 1.101 эВ, а FWHM равна 45 мэВ.

На рис. 3.5 показано изменение спектров ФЛ КТ InGaAs в зависимости от мощности возбуждения. Спектры измерялись при температуре около 110 К. Положение всех пиков ФЛ не зависит от мощности возбуждения, а их интенсивность постепенно увеличивается с увеличением мощности возбуждения. Скорость увеличения намного выше для высокоэнергетических состояний по сравнению с низкоэнергетическим состоянием. Соответствующие преобразования формы спектров ФЛ хорошо видны при одинаковой нормировке спектров для наибольшей и наименьшей мощности возбуждения, как показано в верхних частях рисунков. Такая степенная зависимость характерна для линий ФЛ, связанных с основным и возбужденным состояниями в КТ, тогда как при бимодальном распределении размеров КТ можно было бы ожидать постоянное соотношение интенсивностей двух максимумов.



**Рис. 3.5.** Зависимость ФЛ от мощности разных образцов: (a) BP1857; (b) BP2251; (c) BP2252. В нижней части показаны зависимости интенсивности ФЛ от мощности возбуждения. В верхней части приведены нормированные спектры ФЛ для минимальной и максимальной мощности возбуждения.

Сравнение мощностных зависимостей для разных образцов, представленных на рис. 3.5, показывает существенно более сильную ФЛ от возбужденных состояний

КТ в референтном образце по сравнению с образцами ВР2251 и ВР2252. Во всех образцах не наблюдается заметных изменений энергии пика и ширины линии ФЛ, связанных с основным состоянием.

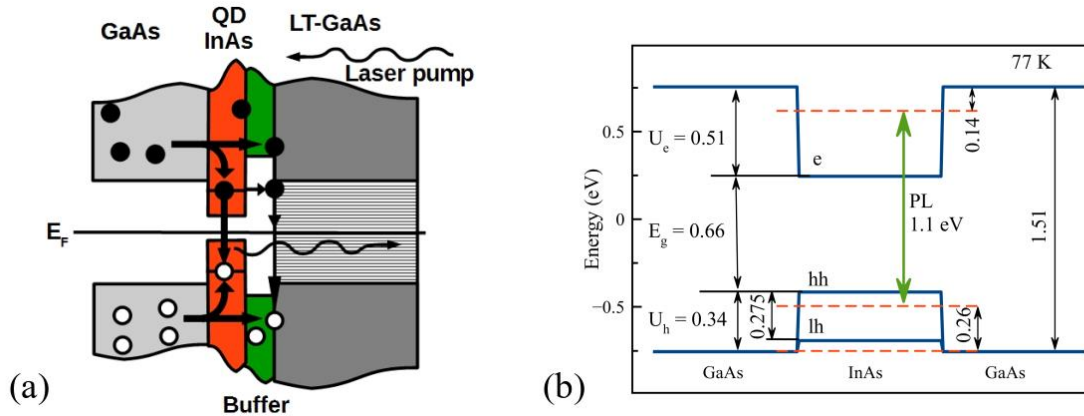
### Обсуждение результатов

Продемонстрированные выше экспериментальные данные показывают значительные изменения интенсивности и формы спектра ФЛ из КТ InGaAs при заращивании GaAs при низкой температуре. Этот факт в целом согласуется с исследованием аналогичной КТ с помощью ПЭМ [Cherkashin, 2013], в котором обсуждается изменение формы и химического состава КТ в процессе заращивания GaAs. Чтобы конкретизировать это утверждение, сравним технологии роста образцов.

КТ InGaAs в образце ВР2251 заращивались GaAs в обычных технологических условиях, идентичных условиям выращивания референтного образца ВР1857. Последующий рост слоя GaAs при пониженной температуре не может вызвать каких-либо существенных изменений в составе и форме заращенных КТ InGaAs. Исключительно на основании этого факта можно было ожидать отсутствие изменений формы линии ФЛ от КТ для образца ВР2251 по сравнению с референтным образцом. Вопреки таким ожиданиям, наше исследование ФЛ выявило в данном случае самое сильное изменение формы линии, связанной с КТ, по сравнению с референтным образцом среди всех других образцов (рис. 3.4).

В случае ВР1858 мы существенно снизили температуру при заращивании по сравнению с референтным образцом, что могло вызвать некоторые изменения в перемешивании In–Ga. Однако это не приводит к каким-то явным изменениям в форме спектра ФЛ, кроме низкой интегральной яркости (рис. 3.4). Мы связываем последнее с формированием дислокаций, которые образуются при заращивании низкотемпературным слоем и были выявлены с помощью ПЭМ на рис. 3.2 (b).

Ниже мы разрешим кажущееся противоречие между ожиданиями и экспериментальными результатами, связанными с ФЛ от КТ InAs, заращенных различными способами. Для более глубокого понимания изменений, происходящих в результате формирования LT слоя, рассмотрим модель, включающую реальную микроструктуру образцов и оптические процессы, связанные с возбуждением и выходом ФЛ. Схематическая иллюстрация приведена на рисунке 3.6 (a).



**Рис. 3.6.** (a) Схематическая иллюстрация процессов, связанных с ФЛ, в образцах; (b) зонная диаграмма КТ InAs.

Сначала рассмотрим возбуждение ФЛ, которое осуществлялось лазерным лучом с длиной волны 660 нм, падающим под углом  $45^\circ$ . Часть этого света отражается границей раздела воздух/GaAs (во всех образцах), а также границами раздела GaAs/AlAs (во всех образцах, кроме референтного). Остальная часть лазерного излучения распространяется через поглощающие среды, так что интенсивность света экспоненциально убывает в соответствии с законом Бугера — Ламберта — Бера. Следует отметить, что структура и толщина слоев, покрывающих КТ InGaAs, в образцах существенно различаются. Поэтому при расчете интенсивности возбуждения использовались структурные данные и комплексные показатели преломления, взятые из работ [Mazur, 2002; Aspens, 1986; Jellison, 1992]. Рассчитанные коэффициенты пропускания, равные интенсивности возбуждающего лазерного излучения в месте расположения слоя КТ InAs, оказались равными 0.69 для ВР1857, 0.65 для ВР1858, 0.46 для ВР2251, 0.46 для ВР2252. Эти результаты расчетов показывают, что несколько более низкое возбуждение не является основной причиной наблюдаемого снижения интенсивности ФЛ КТ InGaAs после заравнивания низкотемпературным слоем.

Другой причиной более высокой интенсивности ФЛ референтного образца по сравнению со всеми остальными может быть большая длина диффузии неравновесных носителей из-за отсутствия низкотемпературного слоя, стимулирующего рекомбинацию носителей. Тем не менее, изменение интенсивности ФЛ не должно сопровождаться её спектральными изменениями.

Энергия фотонов излучения КТ составляет около 1.1 эВ. Зонная диаграмма, соответствующая этой энергии излучения, была рассчитана путем решения уравнения Шрёдингера. Уравнение сначала было решено аналитически для одномерной конечной квантовой ямы. Это позволяет оценить энергию



электронов и дырок в основных состояниях. Соотношение этих энергий оказалось равным  $\sim 5:1$  для различных размеров КТ. Затем приближенные результаты расчетов были подтверждены численным решением уравнения Шредингера для трехмерных пирамидальных КТ InAs, окруженных GaAs. Точная геометрия и распределение In в КТ были взяты из предыдущего электронно-микроскопического исследования [Cherkashin, 2013]. Деформация в системе InAs/GaAs учитывалась, как описано в [Adachi, 2009]. Используя рассчитанное отношение энергий электрона и тяжелой дырки, мы извлекаем энергию квантовых состояний электрона и дырки в КТ из энергии излучения ФЛ. Они показаны на рис. 3.6(b), где потенциальная энергия показана сплошными линиями, а основные квантовые уровни для электронов, легких и тяжелых дырок показаны красными пунктирными линиями. Высоты барьеров  $U_{e,h}$  зависят от разрывов зон для электронов и дырок, отношение которых принималось равным  $U_e:U_h=3:2$ . Следует отметить, что локализирующий потенциал для легких дырок намного ниже, чем для тяжелых из-за встроенной деформации несоответствия [Adachi, 2009]. Следовательно, основной линией в спектрах ФЛ (рис. 3.4 и 3.5) является экситонный переход  $e_1-hh_1$ . Мы также можем заключить, что экспериментально наблюдаемые возбужденные состояния должны быть обусловлены переходами между электронами и тяжелыми дырками с большими квантовыми числами, а не локализованными экситонами легких дырок.

При детальном спектральном анализе следует учитывать, что свет, излучаемый КТ InGaAs, распространяется через поглощающий LT-GaAs, спектры коэффициентов поглощения которого представлены на рис. 3.3. Измеренные относительные коэффициенты пропускания при энергии фотонов 1.1 эВ равны 0.93 для BP1858, 0.94 для BP2251, 0.93 для BP2252 и 1 для референтного образца. Становится очевидным, что поглощение в LT-GaAs не может быть причиной ни существенного уменьшения интенсивности, ни изменения формы линий.

Итак, мы оценили реальное возбуждение ФЛ, учитывая отражение и поглощение мощности лазера накачки, и измерили коэффициент пропускания света, излучаемого КТ InAs. Это позволяет нормировать интегральную яркость ФЛ и исключить эти факторы из дальнейшего анализа. Все остальные изменения в спектрах ФЛ являются результатом конкуренции излучательной и безызлучательной рекомбинации неравновесных носителей, генерируемых лазером накачки. Тогда эффективность ФЛ определяется следующим образом:

$$P = \frac{\frac{1}{\tau_r}}{\frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{nr}}} = \frac{1}{1 + \frac{\tau_r}{\tau_{nr}}} \quad (3.1)$$

где  $\tau_r$  и  $\tau_{nr}$  — радиационное и безызлучательное время жизни, соответственно. В случае ВР1858 наше исследование с помощью ПЭМ выявило большую плотность дислокаций, связанных с КТ InAs (рис. 3.2(b)). Причиной образования дислокаций является несоответствие постоянных решеток КТ InGaAs и барьера GaAs. В случае низкотемпературного зарастивания диффузия и перемешивание атомов происходят относительно медленно, и образование дислокаций несоответствия становится основным процессом релаксации упругой энергии системы [Nevedomskii, 2009; Nevedomskii, 2011; Nevedomskii, 2013]. Таким образом, безызлучательная рекомбинация на дислокациях несоответствия является основной причиной низкой интенсивности фотолюминесценции в образце ВР1858, где КТ InGaAs непосредственно зарастили слоем LT-GaAs.

Дислокации несоответствия были устранены, когда полное или начальное зарастивание КТ слоем GaAs было выполнено при нормальной температуре (см. ПЭМ изображения референтного образца ВР1857, рис. 3.2 (a) и образца ВР2251, рис. 3.2 (c)). Однако интенсивность ФЛ из КТ в образце ВР2251 по-прежнему остается низкой и существенные изменения формы линии ФЛ по сравнению с референтным образцом хорошо видны на рисунке 3.4. Важным отличием ВР2251 от референтного образца является близость к КТ InGaAs слоя LT-GaAs. Последний, как известно, имеет очень короткое время жизни неравновесных носителей из-за очень высокой плотности точечных дефектов, связанных с избыточным мышьяком, до отжига и с высокой плотностью плазмонных нановключений As, формирующихся в результате послеростового отжига [Gupta, 1991; Pastor, 2012; Pastor, 2013; Bert, 1993; Melloch, 1995; Chaldyshev, 2002]. Следует отметить, что низкотемпературный слой не вносит заметных изменений в атомную структуру нижележащего буферного слоя GaAs и КТ InGaAs, которые были выращены при гораздо более высокой температуре.

Для неравновесных носителей заряда, накопленных в КТ InGaAs, излучательная рекомбинация конкурирует с тепловым выбросом обратно на барьер GaAs и туннелированием через барьер GaAs в некоторые состояния в запрещенной зоне LT-GaAs. При относительно низкой температуре 77 К тепловая эмиссия из основного состояния КТ InGaAs на барьер GaAs маловероятна, тогда как туннелирование не зависит от температуры.

Время туннелирования  $\tau_t$  можно определить как произведение полуклассического периода электрона  $T$  в локализирующем потенциале и обратной туннельной прозрачности барьера

$$\tau_t(E_{e,h}) = T \exp \left[ 2 \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m_{e,h}(U_{e,h} - E_{e,h})} \right] \quad (3.2)$$

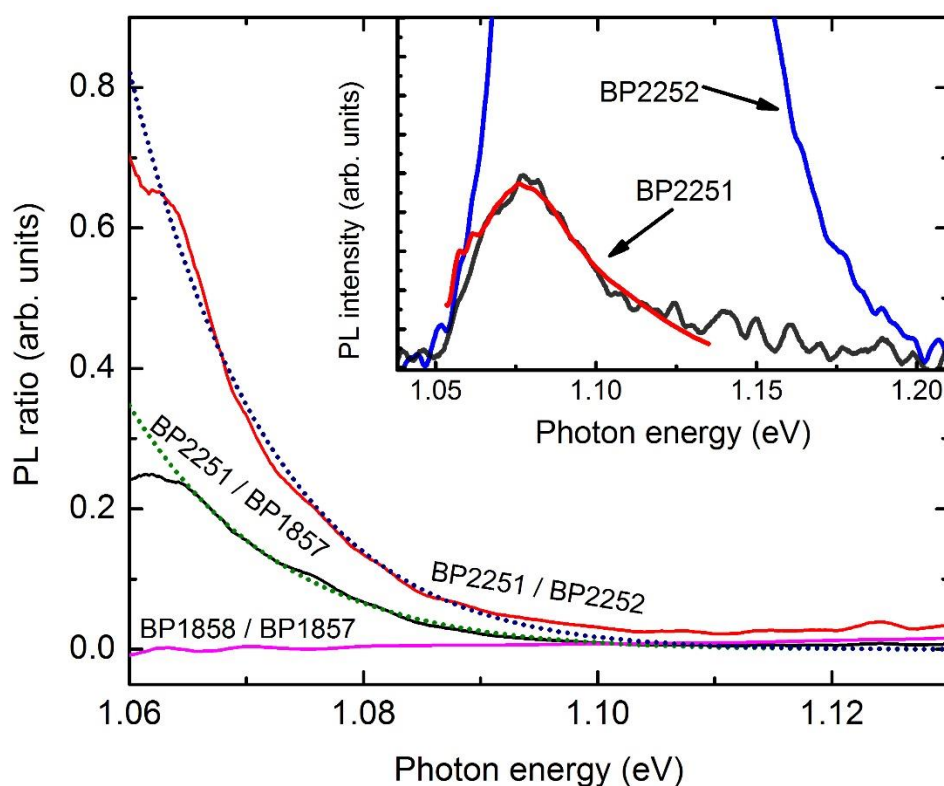
где  $E_{e,h}$  и  $m_{e,h}$  — энергия и эффективная масса электрона (дырки),  $a$  и  $U_{e,h}$  — ширина и высота барьера. Эффективные массы электронов, легких дырок и тяжелых дырок в GaAs равны 0.067, 0.087 и 0.62  $m_0$ , соответственно [Adachi, 1985]. Из-за встроенной упругой деформации, вызванной несогласованием параметров решеток GaAs и InAs, и малой эффективной массы легкие дырки имеют слабую локализацию в КТ InGaAs и не дают вклада в спектры ФЛ. Туннелирование тяжелых дырок гораздо менее вероятно из-за их существенно большей эффективной массы по сравнению с электронами в GaAs. Таким образом, туннелирование электронов должно отвечать за время безызлучательной рекомбинации.

Из-за сильной экспоненциальной зависимости вероятности туннелирования от расстояния туннелирования (выражение (3.2)), основной вклад в поток носителей должно вносить туннелирование электронов из КТ InGaAs, находящихся на самых близких расстояниях от слоя LT-GaAs.

Время туннелирования должно быть разным для КТ разного размера, так как время туннелирования зависит от энергии локализации электрона (дырки) в КТ,  $E_{e,h}$ . Принимая  $\tau_t$  за  $\tau_{nr}$  в выражении (3.2), мы получаем экспоненциальный спектральный коэффициент, который должен модифицировать соответствующую форму линии ФЛ. На рис. 3.7 показано отношение спектров ФЛ образца BP2251 к BP1857 (референтный). Пунктирная линия соответствует подгонке параметров  $a$  и  $U$ , а также  $\tau_r/T$ . Наилучшее соответствие дает  $U_e = (0.41 \pm 0.01)$  эВ и  $a = (19 \pm 2)$  нм, что кажется разумным для барьера, разделяющего электроны, локализованные в КТ InAs, и континуум состояний в LT-GaAs. Обратите внимание, что наша упрощенная модель не учитывает конкретное расположение атомов в каналах туннелирования. Она также не учитывает спектральное и пространственное распределение электронных состояний в LT-GaAs. Известно, что проводимость в LT-GaAs определяется прыжками электронов, сильно локализованных на антиструктурных дефектах или нановключениях мышьяка, распределенных по объему пленки [Shimogishi, 2002]. Пространственное распределение дефектов и электронная структура соответствующей полосы вблизи интерфейса неизвестны. Следовательно, расстояние туннелирования  $a$  является эффективным параметром модели, который должен быть больше геометрической толщины буферного слоя.

В то время как отношение спектров ФЛ BP2251/BP1857 показывает характерное экспоненциальное поведение, отношение спектров ФЛ BP1858/BP1857 почти не зависит от энергии и намного меньше (рис. 3.7). Это означает, что низкая интенсивность ФЛ КТ обусловлена скорее обсуждавшимися выше дислокационными дефектами, чем туннельными процессами.

Модель, связанную с туннелированием, можно проверить, увеличив высоту туннельного барьера. Для этого мы должны сравнить спектры ФЛ для BP2251 и BP2252. Расчет прозрачности барьера по выражению (3.2) при постоянной высоте барьера был заменен интегрированием по сложному барьеру GaAs/AlAs с энергией носителей в окрестности  $\Gamma$  точки, взятой из работы [Adachi, 2009]. Расчет показывает, что буферный слой с AlAs толщиной 2.5 нм, замещающий часть GaAs, делает композитный барьер в  $1.5 \cdot 10^4$  раз менее прозрачным для туннелирования электронов вблизи максимума полосы ФЛ КТ InGaAs. Туннелирование остается возможным только из возбужденных квантовых состояний в КТ InGaAs. В результате высокоэнергетическое плечо в спектре ФЛ референтного образца отсутствует в спектре ФЛ BP2252 (рис. 3.4 и 3.5).



**Рис. 3.7.** Соотношения спектров ФЛ разных образцов. BP1858 относительно BP1857, BP2251 относительно BP1857 и BP2251 относительно BP2252. Сплошные линии — экспериментальные; пунктирные линии — модельные расчеты. На вставке показаны экспериментальные спектры ФЛ с той же линейной шкалой интенсивности для BP2252 (синий) и BP2251 (черный), наложенные модельным расчетом (красный).

Отношение ФЛ BP2251/BP2252, представленное на рис. 3.7 (красная сплошная кривая), показывает характерное поведение, которое может быть аппроксимировано с точки зрения нашей модели туннелирования (пунктирная

кривая). Параметры барьера для ВР2251 оказались равными  $U_e = (0.41 \pm 0.01)$  эВ и  $a = (21 \pm 2)$  нм, т. е. оцененная высота барьера такая же, а толщина барьера довольно близка к той, что соответствует соотношению ФЛ ВР2251/ВР1857. Оба выявленных параметра разумно согласуются с геометрией образцов, показанных с помощью ПЭМ (рис. 3.2) и результатов квантово-механического моделирования (рис. 3.6(b)).

Вставка на рис. 3.7 показывает экспериментальные спектры ФЛ для ВР2251 и ВР2252 в той же линейной шкале. На последнее накладывается наш модельный расчет туннелирования, уменьшающего интенсивность ФЛ и изменяющего форму линии ФЛ. Две наложенные друг на друга кривые очень хорошо согласуются друг с другом, что непосредственно подтверждает нашу модель. В частности, наша модель количественно описывает красное смещение излучения образца ВР2251 по сравнению с референтным.

Таким образом, при объединении массива самоорганизованных КТ InAs и слоя LT-GaAs оптическое излучение КТ оказалось очень чувствительным к буферу, разделяющему две части структуры. Воздействие буфера можно разделить на две составляющие, одной из них является устранение протяженных дефектов при эпитаксиальном росте при экстремально низкой температуре около 200 °С на поверхности с рельефом, созданным КТ. По нашим наблюдениям (рис. 3.2), буферный слой GaAs толщиной 5 нм достаточен для устранения большинства, если не всех, дислокаций такого происхождения.

Другим аспектом является диффузия точечных дефектов из LT-GaAs, пересыщенного мышьяком, к КТ InGaAs. Этот процесс должен вызывать перемешивание In–Ga с определенными изменениями формы, атомной и электронной структуры КТ. Однако наше исследование с помощью ПЭМ не выявило каких-либо связанных с этим заметных изменений в атомной структуре КТ при использовании буфера толщиной 5 нм. Это хорошо согласуется с тем фактом, что длина взаимной диффузии In–Ga при температуре заравнивания 200 °С намного меньше одиночного монослоя [Bert, 1999]. Кроме устранения дефектов важной ролью буфера является ограничение электронного транспорта от КТ InAs в континуум состояний в LT-GaAs. Известно, что электронные состояния в LT-GaAs имеют широкое энергетическое распределение и ультракороткое время релаксации в диапазоне сотен фс. [Gupta, 1991; Pastor, 2012; Pastor, 2013]. Наш анализ показывает, что спектральные изменения могут быть последовательно описаны в терминах квантово-механической модели с геометрическими параметрами, взятыми из ПЭМ. Благодаря экспоненциальной зависимости вероятности туннелирования как от высоты, так и от ширины барьера появляется возможность изменить эффективность

оптического излучения КТ InAs на два порядка. Композитный буфер AlAs толщиной 2.5 нм и GaAs толщиной 3 нм практически полностью блокирует туннелирование электронов.

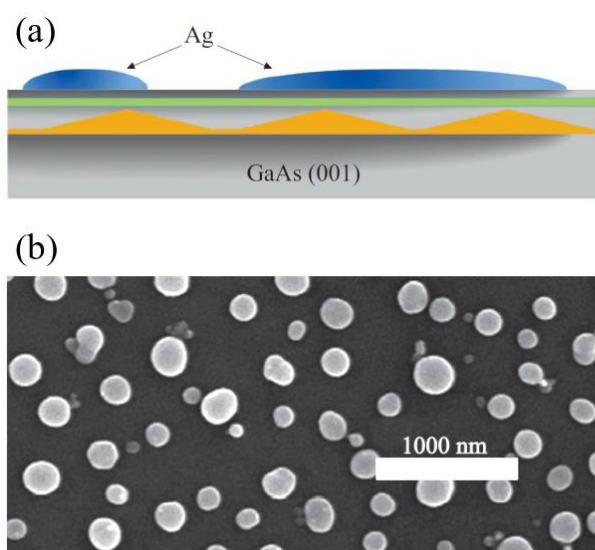
### Заключение

Мы исследовали систему КТ InGaAs, выращенных слоем LT-GaAs, с различными буферными слоями между ними. Мы показали, что буферный слой имеет решающее значение для интенсивности и формы линии ФЛ, связанных с КТ InGaAs. Прямое выращивание при низкой температуре вызвало образование дислокаций несоответствия и связанное с этим падение интенсивности ФЛ из КТ InGaAs. Генерация дефектов была подавлена за счет использования тонких буферных слоев между массивами КТ InAs и слоем LT-GaAs. В случае буферного слоя GaAs толщиной 5 нм ФЛ от КТ InAs на два порядка слабее референтного образца и отличается от него по форме спектрального распределения интенсивности. Мы разработали микроскопическую модель, которая количественно описывает эти изменения путем учета туннелирования электронов из КТ InAs через барьер GaAs в континуум состояний в LT-GaAs. Когда часть буфера GaAs толщиной 2.5 нм была заменена на AlAs, барьер стал непрозрачным для туннелирования электронов из основных состояний в КТ InAs, в результате чего ФЛ КТ стала значительно сильнее, а форма линии близка к форме линии излучения референтного образца. Мы показали, что время жизни неравновесных носителей в КТ InAs может быть изменено на два порядка и контролироваться инженерией ширины запрещенной зоны буферного слоя толщиной всего 5 нм.

## 3.2 Квантовые точки InGaAs в ближнем поле серебряных наночастиц

### Введение

Эпитаксиальные КТ формируются по хорошо изученной технологии и могут быть интегрированы в более сложные приборы, полученные методом МЛЭ. КТ, формируемые при помощи механизма Странского-Крастанова, не требуют литографических методов, так как самоорганизуются при определённых режимах роста. Металлические наночастицы могут быть сформированы на поверхности эпитаксиальной плёнки по механизму Фольмера-Вебера. При неглубоком заращивании КТ InGaAs, эти два вида наночастиц могут оказаться в ближнем поле друг друга. Точное положение плазмонного резонанса в металлической наночастице зависит от материала наночастиц, её размера и формы. Благодаря этим параметрам плазмонный резонанс серебряных наночастиц на поверхности GaAs может быть реализован в инфракрасной области спектра вблизи излучения КТ InGaAs. В этом разделе мы изучаем влияние наночастиц Ag, сформированных на поверхности образца на оптические свойства КТ InGaAs, сформированных вблизи поверхности.



**Рис. 3.8.** (a) схематическое изображение изучаемого образца. КТ помещены в слой  $Al_{0.29}Ga_{0.71}As$ , выращенного на поверхности GaAs. Для защиты от окисления структура закрыта тонким слоем GaAs на поверхности которого были сформированы наночастицы Ag. (b) СЭМ изображение поверхности GaAs с массивом наночастиц Ag

## Образцы

Образцы были выращены<sup>4</sup> на подложках GaAs (001) методом МЛЭ. Сперва выращивался буферный слой GaAs толщиной 0.1 мкм, призванный устранить дефекты. Затем был выращен слой  $\text{Al}_{0.29}\text{Ga}_{0.71}\text{As}$  толщиной 0.2 мкм. Для формирования КТ на его поверхности было осаждено 7 МС InGaAs. Получившиеся КТ были закрыты слоем  $\text{Al}_{0.29}\text{Ga}_{0.71}\text{As}$ , толщиной 15 нм, и, затем, слоем GaAs, толщиной 5 нм, предотвращающим окисление слоя  $\text{Al}_{0.29}\text{Ga}_{0.71}\text{As}$  от контакта с воздухом.

Серебряные наночастицы были сформированы<sup>5</sup> путем напыления слоя Ag толщиной 25 нм на поверхность образцов с КТ с последующим отжигом, который приводил к распаду сплошной пленки на отдельные островки Ag. Мы изучаем два образца: (2855-1), который отжигался на воздухе при температуре 220 °С в течение 40 минут и (2855-2), где отжиг такой же длительности проводился в вакууме при температуре 250 °С с последующим медленным охлаждением. Получившаяся структура схематически представлена на Рис 3.8(a), в то время как, изображение серебряных наночастиц на поверхности GaAs, полученное с помощью сканирующего электронного микроскопа, показано на панели (b).

Также мы рассмотрим пару образцов (BP 2748), где стек из 5-ти вертикально-коррелированных КТ InAs был выращен последовательностью слоев: 3 нм GaAs, 3 нм AlAs, 4 нм GaAs. На части поверхности такой структуры были сформированы наночастицы серебра, полученные в результате напыления слоя Ag, толщиной 10 нм, с последующим отжигом при 200 °С в течение 50 минут. В результате получились наночастицы со средним латеральным размером около 50 нм. Мы проводили сравнения оптических свойств этой части образца с той, на которую плёнка Ag не наносилась.

## Экспериментальные методы

Для возбуждения стационарной ФЛ использовался твердотельный лазер, работающий на длине волны 532 нм с мощностью 90 мВт. Для кинетических исследований ФЛ возбуждалась при помощи импульсного лазера, работающего на длине волны 405 нм. Длительность его импульсов была порядка 0.2 пс и энергия импульса была порядка 65 пДж, а частота повторения 75.75 МГц. В обоих случаях свет лазера фокусировался в точку с диаметром около 0.5 мм.

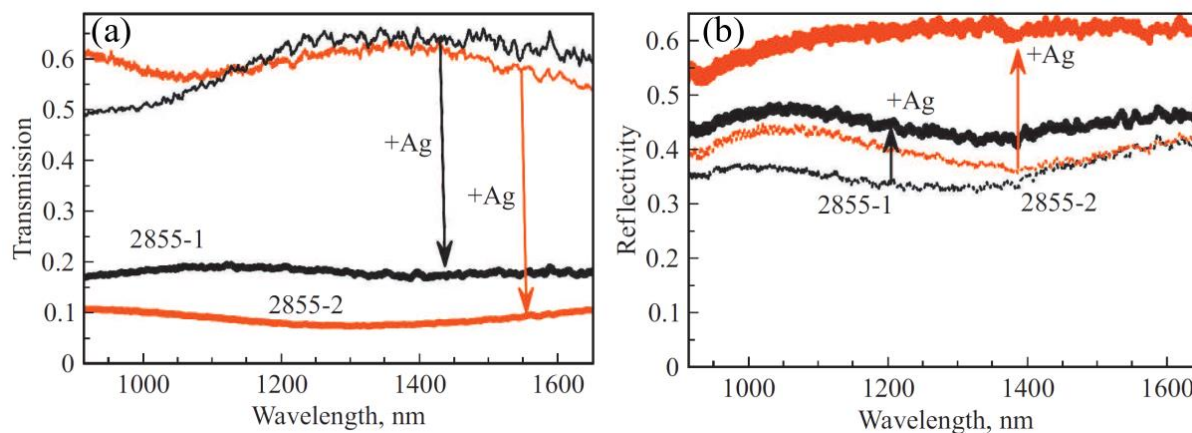
---

<sup>4</sup> Мы благодарим за выращивание образцов В.В. Преображенского, М.А. Путято и Б.Р. Семягина из института физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук

<sup>5</sup> Мы благодарим за формирование металлических наночастиц Т. Вартаняна, Н. Торопова, И. Гладских и П. Гладских



Кинетика ФЛ была записана при помощи стрик-камеры фирмы Hamamatsu в режиме счёта фотонов.



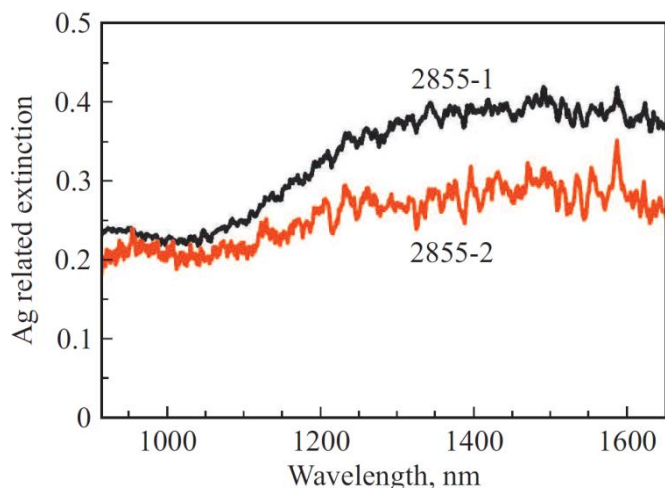
**Рис. 3.9.** Спектральные зависимости коэффициентов (а) пропускания и (б) отражения. Чёрные линии соответствуют образцу 2855-1, красные образцу 2855-2. Тонкие линии соответствуют части образца, не покрытой металлическими наночастицами, а толстые покрытой.

Спектры отражения были измерены при помощи лампы фирмы OSRAM, подключенной к стабилизированному источнику тока. Спектры ФЛ были измерены при помощи микроспектрометров OceanOptics NIR Quest-512 и OceanOptics HR4000, обладающими чувствительностью в разных диапазонах благодаря различным материалам светочувствительных матриц. Первый из них был сделан на основе InGaAs и обладал заявленной светочувствительностью в диапазоне 900-1700 нм. Второй спектрометр был сделан на основе Si и обладал светочувствительностью в диапазоне 200-1100 нм. Спектрометры были калиброваны таким образом, что их спектры корректно сшивались. ФЛ была измерена при различных температурах в диапазоне от 2 до 80 К.

### Результаты измерений

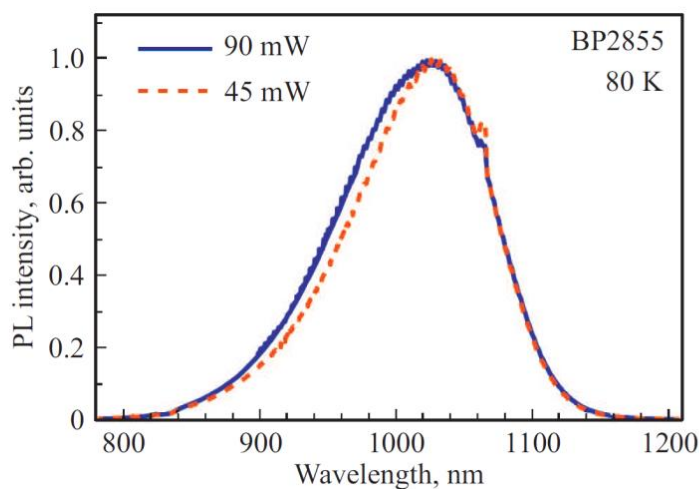
На рис. 3.9 (а) и (б) показаны спектры пропускания и отражения обоих образцов. Видно, что за счёт появления наночастиц Ag, увеличивается отражение и, соответственно, уменьшается пропускание света. На рис. 3.10 представлены спектры экстинкции серебряных наночастиц, которые были рассчитаны исходя из данных на рис. 3.9. Наночастицы имеют максимальное поглощение в диапазоне длин волн от 1.2 до 1.6 мкм. Хотя обычно плазменная частота серебра соответствует ультрафиолетовой области спектра, форма наночастиц и диэлектрическая проницаемость подложки сдвигает плазмонный резонанс в сторону длинных волн. Электронно-микроскопические исследования показывают, что наночастицы серебра сильно сплюснены в направлении роста. Это должно приводить к длинноволновому сдвигу резонансных частот

плазмонных колебаний в плоскости образца. Дополнительный сдвиг плазмонного резонанса в длинноволновую область обеспечивает большая величина диэлектрической проницаемости GaAs, на поверхности которого формируются плазмонные наночастицы.



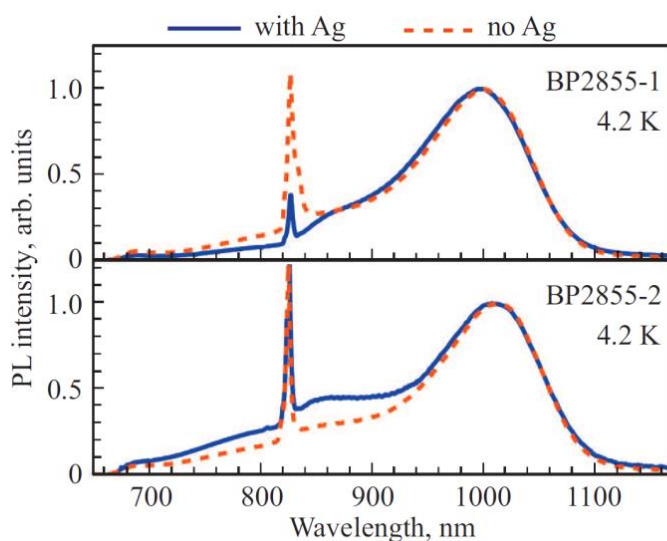
**Рис. 3.10.** Спектры экстинкции наночастиц Ag на поверхности GaAs, полученные из данных, представленных на Рис. 3.9.

Спектры ФЛ из изучаемых КТ до формирования наночастиц Ag показаны на рис. 3.11. Спектр ФЛ выглядит как слегка ассиметричный купол с максимумом в районе 1.03 мкм и FWHM порядка 0.1 мкм. Показаны спектры при различающихся вдвое мощностях возбуждения с одинаковой нормировкой. Видно, что при большей интенсивности возбуждения ФЛ в диапазоне 0.9–1 мкм несколько увеличивается. Мы связываем это изменение с излучением возбуждённых состояний, которые могут заполниться при большей концентрации фотовозбуждённых носителей.



**Рис. 3.11.** Нормированные спектры ФЛ, полученные при стационарном возбуждении КТ с разными интенсивностями при температуре 80 К.

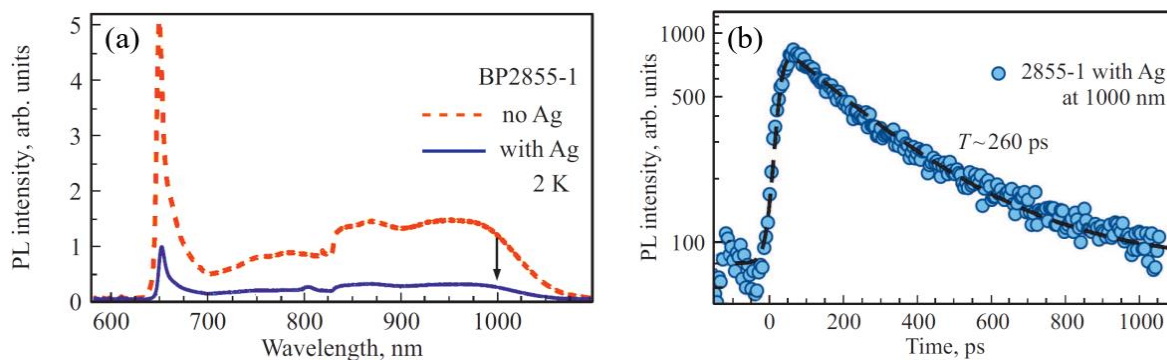
Изменение ФЛ под действием наночастиц Ag показано на Рис. 3.12., измерения проводились при температуре 4.2 К, спектры нормированы на максимум в районе 1.03 мкм. Синими линиями показаны спектры ФЛ из образцов, модифицированных наночастицами Ag, а красными штриховыми линиями показаны спектры ФЛ исходного образца. Для того, чтобы можно было сравнить форму спектров – они имеют одинаковую нормировку. Отметим, что наночастицы снижают интенсивность ФЛ в образце 2855-1 в 2 раза, а в образце 2855-2 в 4 раза. При этом спектральное распределение интенсивности практически не меняются в области длин волн около и больше 1 мкм, в то время как, присутствие наночастиц Ag слегка ослабляет ФЛ в диапазоне 0.7–0.9 мкм в образце 2855-1 и усиливает ФЛ в образце 2855-2.



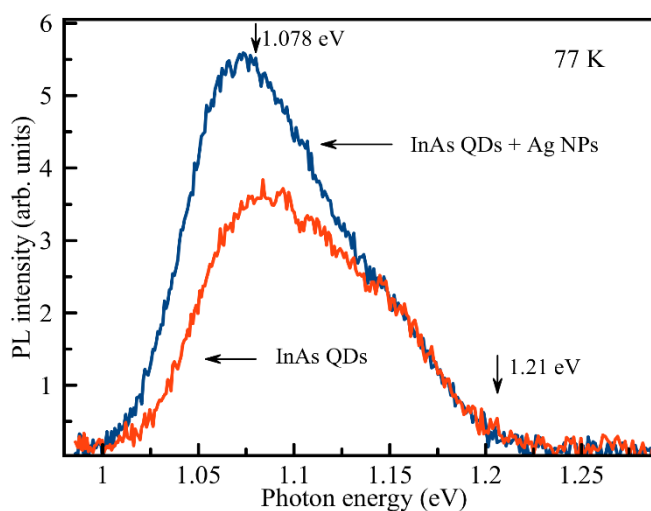
**Рис. 3.12.** Спектры ФЛ, измеренные при 4.2 К с использованием стационарного возбуждения. Синие линии соответствуют частям образца, покрытым наночастицами Ag, в то время как, красная штриховая соответствует измерениям с той части образца, которая не покрытой наночастицами. Спектры нормированы одинаково на максимум в районе 1 мкм.

Спектры ФЛ, возбуждённые импульсным лазером, существенно отличаются из-за иной плотности мощности, а также изменившейся зоны локализации возбуждения, продиктованной иным коэффициентом поглощения длин волн относительно стационарных экспериментов. Результаты измерения изображены на рис. 3.13 (а), спектры не нормированы. Видно различие в амплитудах ФЛ в образце с наночастицами Ag и без них. Формы спектров качественно совпадают, но интенсивность сигнала из части образца, не закрытой наночастицами Ag, существенно выше. Во всём спектральном диапазоне ФЛ, показанном на рис. 3.13 (а) динамика ФЛ из КТ обладает схожими временами затухания около 0.25 нс. Пример такой динамики показан на Рис 3.13(б), она

близка к экспоненциальной. В образце 2855-2 в присутствии наночастиц Ag интенсивность ФЛ сократилась вдвое, как и время её затухания. Мы связываем такое поведение с появлением безызлучательного канала рекомбинации экситонов, локализованных в КТ, при формировании ансамбля наночастиц Ag.



**Рис. 3.13.** (a) Спектры ФЛ КТ из образца 2855-1, измеренные при импульсном возбуждении и температуре 2 К. Синяя линия соответствует части образца покрытой наночастицами Ag, в то время как, красная штриховая непокрытой части образца. (b) ФЛ, записанная с временным разрешением на длине волны 1 мкм.

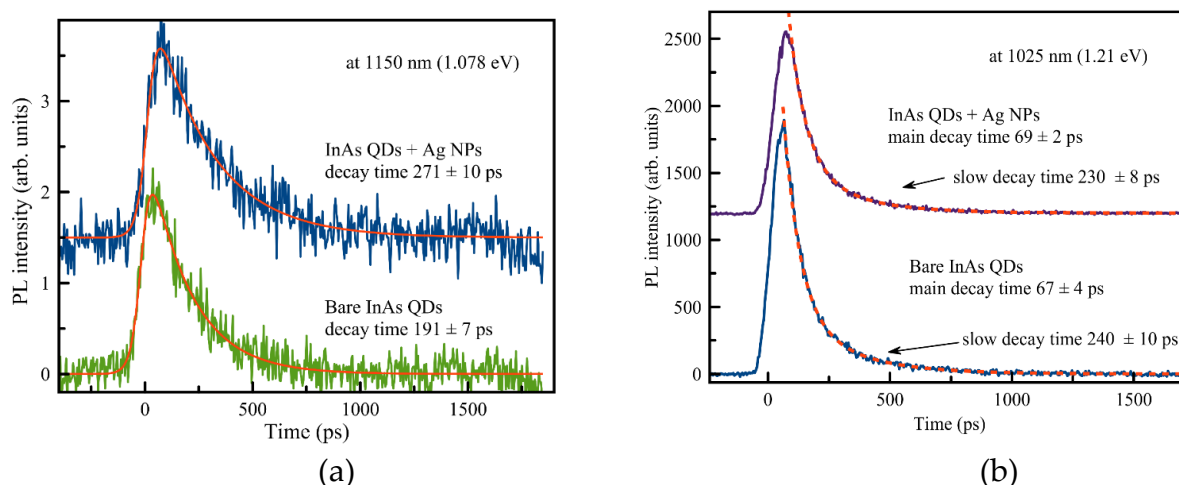


**Рис. 3.14.** Стационарная фотолюминесценция, полученная с двух частей образца BP 2748, покрытых наночастицами Ag и свободным от них.

В образце BP2748 формирование наночастиц Ag на поверхности, напротив, усилило интенсивность ФЛ (рис.3.14). Интенсивность сигнала стала примерно в 1.5 раза больше в окрестности 1.05 эВ ( $\approx 1.2$  мкм). При энергии фотона больше 1.15 эВ ( $< 1.08$  мкм) интенсивности излучения одинаковы, таким образом это изменение затрагивает только КТ с низкими энергиями. На рис. 3.15 показаны ФЛ с временным разрешением, записанные в двух спектральных диапазонах: где

интенсивность ФЛ одинаковая и где она отличается, которые отмечены на рис. 3.14 вертикальными стрелками.

В спектральной области, где интенсивность ФЛ усилилась под действием наночастиц Ag, усиление интенсивности ФЛ сопровождается увеличением времени её затухания (см. рис. 3.15(a)). Под действием наночастиц оно увеличивается с  $\approx 0.2$  нс до  $\approx 0.27$  нс. В спектральной области, где интенсивность ФЛ не изменилась под действием наночастиц Ag время её затухания ФЛ также не изменилось, что показано на рис. 3.15(b). Амплитуды сигнала в этом спектральном диапазоне значительно выше за счёт большей чувствительности стрик-камеры. Аппроксимация показывает, два характерных времени затухания сигнала, которые в обоих случаях составляют  $\approx 0.24$  и  $\approx 0.07$  нс.



**Рис. 3.15.** Фотолуминесценция с временным разрешением, полученная с двух частей образца ВР 2748, покрытых наночастицами Ag и свободным от них. Измерения проводились в двух спектральных диапазонах: (a) в окрестности 1.078 эВ (1.15 мкм), где наблюдается усиление ФЛ; (b) в окрестности 1.21 эВ (1.02 мкм), где усиление ФЛ не наблюдается.

Такой эффект возможен за счёт подавления канала безызлучательной рекомбинации экситонов. Основным механизмом рекомбинации в этом случае мы полагаем туннелирование локализованных в КТ электронов на поверхностные состояния, находящиеся в достаточной близости. Формирование на поверхности наночастиц Ag приводит к смещению уровня Ферми [Waddill, 1989], приводящего к уменьшению туннельной прозрачности барьера. Туннельная прозрачность обладает экспоненциальной чувствительностью к величине туннельного барьера, поэтому даже небольшое изменение

поверхностного потенциала оказывает значительное влияние на время жизни носителей заряда.

## Заключение

Исследовались массивы КТ InGaAs, находящиеся в приповерхностном слое различного состава. На поверхности образцов осаждались тонкие плёнки Ag, которые затем были отожжены для формирования наночастиц.

Было показано, что в зависимости от процессов роста структуры, наночастицы Ag меняют её оптические свойства различным образом. В случае образца ВР2855-1 формирование наночастиц Ag ослабило интенсивность ФЛ, при этом кинетика ФЛ осталась прежней. В образце ВР2855-2 ослабление ФЛ сопровождалось сокращением времени ФЛ. В образце ВР2748 усиление ФЛ сопровождалось увеличением времени её затухания.

Мы связываем такие изменения с управлением каналами безызлучательной рекомбинации носителей, локализованных в КТ. Этим каналом мы полагаем туннелирование электронов из КТ на поверхностные состояния, либо сами наночастицы. Также, осаждение металла на поверхность может приводить к изменению её поверхностного потенциала, а следовательно, и профиля туннельного барьера.

Таким образом, оптические свойства КТ в гибридных структурах, полученных путем совмещения массивов полупроводниковых квантовых точек InGaAs, расположенных в приповерхностном слое, и наночастиц Ag, сформированных на поверхности путём отжига тонкой плёнки, крайне чувствительна к толщине барьера и поверхностному потенциалу. В зависимости от геометрии и туннельной прозрачности разделяющих материалов формирование наночастиц Ag может как усиливать, так и ослаблять безызлучательную рекомбинацию в таких квантовых точках.

На основании результатов этой главы было сформулировано следующее положение, выносимое на защиту:

3. В гибридных структурах, содержащих квантовые точки InGaAs и металлические наночастицы, время жизни локализованных в квантовой точке электронов и дырок определяется структурой разделительного барьера и разностью потенциалов между элементами структуры. В структурах с разделительным барьером GaAs толщиной около 5 нм основным механизмом передачи энергии между квантовыми точками и наночастицами является туннелирование

## Заключение

Основные результаты работы:

1. Полная упругая энергия пирамидальной квантовой точки InAs, сформированной на подложке GaAs по механизму Странского-Крастанова, уменьшается, когда она становится более плоской при неизменном объёме. Это означает, что существует термодинамическая движущая сила, которая вызывает соответствующее изменение формы поверхностных квантовых точек в процессе их эпитаксиального зарастивания.
2. Изменение отношения высоты к длине основания пирамидальной квантовой точки InGaAs приводит к перераспределению компонент тензора упругих деформаций. Более плоские квантовые точки обладают меньшей энергией гидростатических деформаций, но большей энергией девиаторных деформаций.
3. Зависимость энергии оптического излучения пирамидальной квантовой точки от соотношения высоты (H) к длине основания (L) при постоянном объёме обладает минимумом. Наименьшая энергия излучаемых квантовой точкой InGaAs фотонов достигается при  $L/H \approx 0.2$ .
4. Глубина локализации носителей в квантовой точке InAs при зарастивании квантовой ямой InGaAs увеличивается по сравнению с такой же квантовой точкой в объёме GaAs за счёт совместного действия *трёх* механизмов: (1) перераспределение упругих полей, вызванное квантовой ямой; (2) увеличение объёма квантовой точки и (3) изменение формы квантовой точки. Получены численные значения этих вкладов. Показано хорошее согласие результатов расчетов с известными экспериментальными данными.
5. Когда объём квантовой точки и толщина квантовой ямы строго ограничены требованиями когерентности интерфейсов, существует предел улучшения локализации экситонов для системы DWELL InAs-GaAs по сравнению с квантовой точкой InGaAs в объёме GaAs. Согласно нашим расчетам, для этой системы он составляет 176 мэВ.
6. Создана модель квантовой точки InGaAs на основе пространственного распределения In, определённого из электронной микроскопии. Проведены расчеты упругих полей, а также энергий и волновых функций основных состояний электронов и дырок, локализованных в такой квантовой точке. Результаты расчетов в рамках этой модели энергий локализованных электронов и дырок хорошо количественно согласуются с измеренными спектрами фотолюминесценции.
7. Модель, основанная на экспериментально определенном распределении индия внутри квантовой точки InGaAs, предсказывает необычную бубликоподобную форму волновой функции для основного состояния

- локализованной тяжелой дырки. При этом волновая функция основного состояния локализованного электрона имеет форму колокола.
8. В системе, где квантовые точки находятся в непосредственной близости к GaAs, выращенному при пониженной температуре, разделительный слой между ними имеет решающее значение для интенсивности и формы фотолюминесценции из квантовых точек.
  9. Непосредственное заращивание квантовых точек InGaAs слоем GaAs при пониженной температуре роста приводит к формированию дислокаций, приводящему к падению интенсивности фотолюминесценции из квантовых точек. Для предотвращения формирования дислокаций достаточно использовать разделительный слой GaAs толщиной 5 нм, либо комбинацию GaAs и AlAs такой же толщины.
  10. Использование тонких разделительных слоёв между квантовыми точками InGaAs и слоем GaAs, выращенным при пониженной температуре, может приводить к туннелированию электронов через такие слои, что приводит к ослаблению интенсивности фотолюминесценции из таких квантовых точек.
  11. Туннелированием носителей заряда из квантовых точек InGaAs в близкорасположенный слой GaAs, выращенный при пониженной температуре и обладающий сверхкороткими временами жизни носителей, можно управлять, конструируя разделительный слой между ними. В частности, использование комбинации разделительных слоев GaAs и AlAs суммарной толщиной 5 нм позволяет остановить туннелирование электронов из основного состояния, оставляя возможность туннелирования из возбуждённых состояний в КТ.
  12. Оптические свойства КТ в гибридных структурах, полученных путем совмещения массивов полупроводниковых квантовых точек InGaAs, расположенных в приповерхностном слое, и наночастиц Ag, сформированных на поверхности путём отжига тонкой плёнки, крайне чувствительна к толщине и форме барьера, а также поверхностному потенциалу. В зависимости от геометрии и туннельной прозрачности разделяющих материалов формирование наночастиц Ag может как усиливать, так и ослаблять безызлучательную рекомбинацию в таких квантовых точках.



### **Благодарности**

Хочу поблагодарить моего руководителя Чалдышева Владимира Викторовича за открытие увлекательного мира физики, мудрое наставничество и терпение.

Также я очень благодарен всем моим соавторам за вклад работу, в особенности Н. Черкашину за обсуждение моделей квантовых точек и их стыковку с данными микроскопии, В. Преображенского, М. Пуцято, Б. Семягина за рост образцов, Н. Берта и В. Неведомского за микроструктурный анализ, Т. Вартамяна, Н. Торопова, И. Гладских и П. Гладских за знакомство с миром серебряных наночастиц.

Отдельная благодарность И. Акимову за длительную совместную работу, моё знакомство со сверхбыстрой и когерентной спектроскопией, а также понимание.

Благодарю моих коллег А. Коновалова, С. Кухтарука, А. Каменского, Д. Яремкевича, Н. Козырева, А. Кондикова, А. Трифонова, Д. Яковлева, С. Полтавцева, М. Нестоклона, Ш. Гризарда, Л. Кломпмакера и А. Ильину за многочисленные обсуждения и обмен опытом. А также М. Косареву и Е. Соболеву за помощь в этом нелёгком пути.

## Список литературы

- [Adachi, 1985] Adachi S. GaAs, AlAs, and  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ : Material parameters for use in research and device applications //Journal of Applied Physics. – 1985. – Т. 58. – №. 3. – С. R1-R29.
- [Adachi, 1992] Adachi S. Physical properties of III-V semiconductor compounds. – John Wiley & Sons, 1992.
- [Adachi, 1994] Adachi S., Tu C. W. Physical Properties of III-V Semiconductor Compounds: InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs and InGaAsP //Physics Today. – 1994. – Т. 47. – №. 2. – С. 99.
- [Adachi, 2009] Adachi S. Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors. – John Wiley & Sons, 2009.
- [Adelmann, 2000] Adelmann C. et al. Self-assembled InGaN quantum dots grown by molecular-beam epitaxy //Applied Physics Letters. – 2000. – Т. 76. – №. 12. – С. 1570-1572.
- [Alferov, 2001] Alferov Z. I. Nobel Lecture: The double heterostructure concept and its applications in physics, electronics, and technology //Reviews of modern physics. – 2001. – Т. 73. – №. 3. – С. 767.
- [Arakawa, 1982] Arakawa Y., Sakaki H. Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current //Applied physics letters. – 1982. – Т. 40. – №. 11. – С. 939-941.
- [Aroutiounian, 2001] Aroutiounian V. et al. Quantum dot solar cells //Journal of Applied Physics. – 2001. – Т. 89. – №. 4. – С. 2268-2271.
- [García, 2021] García de Arquer F. P. et al. Semiconductor quantum dots: Technological progress and future challenges //Science. – 2021. – Т. 373. – №. 6555. – С. eaaz8541.
- [Asahi, 2019] Asahi S., Kaizu T., Kita T. Adiabatic two-step photoexcitation effects in intermediate-band solar cells with quantum dot-in-well structure //Scientific Reports. – 2019. – Т. 9. – №. 1. – С. 1-8.
- [Ashoori, 1996] Ashoori R. C. Electrons in artificial atoms //Nature. – 1996. – Т. 379. – №. 6564. – С. 413-419.
- [Aspnes, 1986] Aspnes D. E. et al. Optical properties of  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  //Journal of applied physics. – 1986. – Т. 60. – №. 2. – С. 754-767.
- [Barabási, 1999] Barabási A. L. Thermodynamic and kinetic mechanisms in self-assembled quantum dot formation //Materials Science and Engineering: B. – 1999. – Т. 67. – №. 1-2. – С. 23-30.
- [Bayer, 2019] Bayer M. Bridging two worlds: colloidal versus epitaxial quantum dots //Annalen der Physik. – 2019. – Т. 531. – №. 6. – С. 1900039.

- [Bert, 1993] Bert N. A., Veinger A. I., Vilisova M. D. SI Golo shchapov, IV Ivonin, SV Kozyrev, AE Kunitsyn, LG Lavrent'eva, DI Lubyshev, VV Preobrazhen skii, BR Semyagin, VV Tret'yakov, VV Chaldyshev, and MP Yakubenya //Phys. Solid State. – 1993. – T. 35. – №. 10. – C. 1289.
- [Bert, 1999] Bert N. A. et al. In–Ga intermixing in low-temperature grown GaAs delta doped with In //Applied physics letters. – 1999. – T. 74. – №. 10. – C. 1442-1444.
- [Bert, 2002] Bert N. A. et al. Elastic behavior of a spherical inclusion with a given uniaxial dilatation //Physics of the Solid State. – 2002. – T. 44. – №. 12. – C. 2240-2250.
- [Bert, 2009] Bert N. A. et al. Formation of dislocation defects in the process of burying of InAs quantum dots into GaAs //Semiconductors. – 2009. – T. 43. – №. 10. – C. 1387-1393.
- [Bir, 1974] Bir G. L. et al. Symmetry and strain-induced effects in semiconductors. – New York : Wiley, 1974. – T. 484.
- [Bruls, 2002] Bruls D. M. et al. Determination of the shape and indium distribution of low-growth-rate InAs quantum dots by cross-sectional scanning tunneling microscopy //Applied physics letters. – 2002. – T. 81. – №. 9. – C. 1708-1710.
- [Brunner, 2001] Brunner K. Si/ge nanostructures //Reports on Progress in Physics. – 2001. – T. 65. – №. 1. – C. 27.
- [Blokland, 2009] Blokland J. H. et al. Ellipsoidal InAs quantum dots observed by cross-sectional scanning tunneling microscopy //Applied Physics Letters. – 2009. – T. 94. – №. 2.
- [Chaldyshev, 2009] Chaldyshev V. V. et al. Stress relaxation scenario for buried quantum dots //Physical Review B. – 2009. – T. 79. – №. 23. – C. 233304.
- [Cherkashin, 2013] Cherkashin N. et al. Determination of stress, strain, and elemental distribution within In (Ga) As quantum dots embedded in GaAs using advanced transmission electron microscopy //Applied Physics Letters. – 2013. – T. 102. – №. 17. – C. 173115.
- [Cherkashin, 2017] Cherkashin N., Denneulin T., Hÿtch M. J. Electron microscopy by specimen design: application to strain measurements //Scientific reports. – 2017. – T. 7. – №. 1. – C. 1-8.
- [Daruka, 1999] Daruka I., Tersoff J., Barabási A. L. Shape transition in growth of strained islands //Physical review letters. – 1999. – T. 82. – №. 13. – C. 2753.
- [Ebiko, 1998] Ebiko Y. et al. Island size scaling in InAs/GaAs self-assembled quantum dots //Physical review letters. – 1998. – T. 80. – №. 12. – C. 2650.
- [Eisaman, 2011] Eisaman M. D. et al. Invited review article: Single-photon sources and detectors //Review of scientific instruments. – 2011. – T. 82. – №. 7. – C. 071101.

- [Ekert, 1992] Ekert A. K. Quantum Cryptography and Bell's Theorem //Quantum Measurements in Optics. – Springer, Boston, MA, 1992. – C. 413-418.
- [Eshelby, 1957] Eshelby J. D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems //Proceedings of the royal society of London. Series A. Mathematical and physical sciences. – 1957. – T. 241. – №. 1226. – C. 376-396.
- [Eshelby, 1959] Eshelby J. D. The elastic field outside an ellipsoidal inclusion //Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. – 1959. – T. 252. – №. 1271. – C. 561-569.
- [Ezra, 2013] Ezra Y. B., Lembrikov B. I. Synchronized Carrier Dynamics in Quantum Dot-in-a-Well (QDWELL) Laser Under an Optical Injection //IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. – 2013. – T. 19 – №. 5.
- [Ezra, 2014] Ezra Y. B., Lembrikov B. I. Quantum dot-in-a-well (QDWELL) laser dynamics under optical injection //Optical and Quantum Electronics. – 2014. – T. 46. – №. 10. – C. 1239-1245.
- [Frecker, 2015] Frecker T. et al. Quantum dots and their application in lighting, displays, and biology //ECS Journal of Solid State Science and Technology. – 2015. – T. 5. – №. 1. – C. R3019.
- [Fry, 2000] Fry P. W. et al. Inverted electron-hole alignment in InAs-GaAs self-assembled quantum dots //Physical review letters. – 2000. – T. 84. – №. 4. – C. 733.
- [Gisin, 2007] Gisin N., Thew R. Quantum communication //Nature photonics. – 2007. – T. 1. – №. 3. – C. 165-171.
- [Gladskikh, 2015] Gladskikh P. V. et al. Correlation between structural, optical, and electrical properties of self-assembled plasmonic nanostructures on the GaAs surface //Journal of Nanoparticle Research. – 2015. – T. 17. – №. 11. – C. 1-6.
- [Goldstein, 1985] Goldstein L. et al. Growth by molecular beam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strained-layer superlattices //Applied Physics Letters. – 1985. – T. 47. – №. 10. – C. 1099-1101.
- [Govorov, 2006] Govorov A. O. et al. Exciton– plasmon interaction and hybrid excitons in semiconductor– metal nanoparticle assemblies //Nano letters. – 2006. – T. 6. – №. 5. – C. 984-994.
- [Grundmann, 1995] Grundmann M., Stier O., Bimberg D. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure //Physical Review B. – 1995. – T. 52. – №. 16. – C. 11969.
- [Gupta, 1991] Gupta S., Frankel M. Y. JA valdmanis, JF Whitaker, GA Mourou, FW Smith, and AR Calawa //Appl. Phys. Lett. – 1991. – T. 59. – C. 3276.
- [Hadfield, 2009] Hadfield R. H. Single-photon detectors for optical quantum information applications //Nature photonics. – 2009. – T. 3. – №. 12. – C. 696-705.

- [Hafenbrak, 2007] Hafenbrak R. et al. Triggered polarization-entangled photon pairs from a single quantum dot up to 30 K //New Journal of Physics. – 2007. – T. 9. – №. 9. – C. 315.
- [Haxha, 2009] Haxha V. et al. Role of segregation in InAs/GaAs quantum dot structures capped with a GaAsSb strain-reduction layer //Physical Review B. – 2009. – T. 80. – №. 16. – C. 165334.
- [Inoue, 2008] Inoue T. et al. Electron tomography of embedded semiconductor quantum dot //Applied Physics Letters. – 2008. – T. 92. – №. 3. – C. 031902.
- [Jellison, 1992] Jellison Jr G. E. Optical functions of GaAs, GaP, and Ge determined by two-channel polarization modulation ellipsometry //Optical Materials. – 1992. – T. 1. – №. 3. – C. 151-160.
- [Kim, 2011] Kim T. H. et al. Full-colour quantum dot displays fabricated by transfer printing //Nature photonics. – 2011. – T. 5. – №. 3. – C. 176-182.
- [Kolesnikova, 2007] Kolesnikova A. L., Romanov A. E., Chaldyshev V. V. Elastic-energy relaxation in heterostructures with strained nano-inclusions //Physics of the Solid State. – 2007. – T. 49. – №. 4. – C. 667-674.
- [Kosarev, 2022] Kosarev A. N. et al. Extending the time of coherent optical response in ensemble of singly-charged InGaAs quantum dots //Communications Physics. – 2022. – T. 5. – №. 1. – C. 1-7.
- [Kratzer, 2006] Kratzer P. et al. Shape transition during epitaxial growth of InAs quantum dots on GaAs (001): Theory and experiment //Physical Review B. – 2006. – T. 73. – №. 20. – C. 205347.
- [Kwiat, 1995] Kwiat P. G. et al. New high-intensity source of polarization-entangled photon pairs //Physical Review Letters. – 1995. – T. 75. – №. 24. – C. 4337.
- [Ledentsov, 2010] Ledentsov N. N. Quantum dot laser //Semiconductor Science and Technology. – 2010. – T. 26. – №. 1. – C. 014001.
- [Ledentsov, 2018] Ledentsov N. N. et al. Room-temperature yellow-orange (In, Ga, Al) P–GaP laser diodes grown on (n11) GaAs substrates //Optics express. – 2018. – T. 26. – №. 11. – C. 13985-13994.
- [Lee, 2007] Lee J. et al. Exciton–plasmon interactions in molecular spring assemblies of nanowires and wavelength-based protein detection //Nature materials. – 2007. – T. 6. – №. 4. – C. 291-295.
- [Li, 2007] Li H. W. et al. Quantum dot resonant tunneling diode for telecommunication wavelength single photon detection //Applied physics letters. – 2007. – T. 91. – №. 7. – C. 073516.
- [Li, 2019] Li W. et al. The effect of post-growth rapid thermal annealing on InAs/InGaAs dot-in-a-well structure monolithically grown on Si //Journal of Applied Physics. – 2019. – T. 125. – №. 13. – C. 135301.

- [Lim, 2007] Lim H. et al. High-performance InAs quantum-dot infrared photodetectors grown on InP substrate operating at room temperature //Applied physics letters. – 2007. – T. 90. – №. 13. – C. 131112.
- [Liu, 2000] Liu H. Y. et al. Structural and optical properties of self-assembled InAs/GaAs quantum dots covered by In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (0 ≤ x ≤ 0.3) //Journal of Applied Physics. – 2000. – T. 88. – №. 6. – C. 3392-3395.
- [Liu, 2004] Liu H. Y. et al. Improved performance of 1.3 μ m multilayer InAs quantum-dot lasers using a high-growth-temperature GaAs spacer layer //Applied Physics Letters. – 2004. – T. 85. – №. 5. – C. 704-706.
- [Liu, 1995] Liu X. A. Prasard, J. Nishio, ER Weber, Z. Liliental-Weber and W. Walukiewicz, "Native point defects in low-temperature-grown GaAs //Appl. Phys. Lett. – 1995. – T. 67. – C. 279-281.
- [Luque, 1997] Luque A., Martí A. Increasing the efficiency of ideal solar cells by photon induced transitions at intermediate levels //Physical review letters. – 1997. – T. 78. – №. 26. – C. 5014.
- [Lyamkina, 2014] Lyamkina A. A. et al. Exciton-plasmon interaction in hybrid quantum dot/metal cluster structures fabricated by molecular-beam epitaxy //JETP letters. – 2014. – T. 99. – №. 4. – C. 219-223.
- [Marent, 2010] Marent A. et al. The QD-Flash: a quantum dot-based memory device //Semiconductor Science and Technology. – 2010. – T. 26. – №. 1. – C. 014026.
- [Martin, 1981] Martin G. M. Optical assessment of the main electron trap in bulk semi-insulating GaAs //Applied Physics Letters. – 1981. – T. 39. – №. 9. – C. 747-748.
- [Matthews, 1974] Matthews J. W., Blakeslee A. E. Defects in epitaxial multilayers: I. Misfit dislocations //Journal of Crystal growth. – 1974. – T. 27. – C. 118-125.
- [Mazur, 2002] Mazur Y. I. et al. Photoluminescence study of carrier transfer among vertically aligned double-stacked InAs/GaAs quantum dot layers //Applied physics letters. – 2002. – T. 81. – №. 13. – C. 2469-2471.
- [Melloch, 1995] Melloch M. R. et al. Low-temperature grown III-V materials //Annual Review of Materials Science. – 1995. – T. 25. – №. 1. – C. 547-600.
- [Motes, 2015] Motes K. R. et al. Linear optical quantum metrology with single photons: exploiting spontaneously generated entanglement to beat the shot-noise limit //Physical review letters. – 2015. – T. 114. – №. 17. – C. 170802.
- [Moustakas, 2008] Moustakas T. D. et al. Growth of III-nitride quantum dots and their applications to blue-green LEDs //physica status solidi (a). – 2008. – T. 205. – №. 11. – C. 2560-2565.
- [Mura, 1987] Mura T. Micromechanics of Defects in Solids, Martinus Nijhoff Publ. – 1987.

- [Nakajima, 1999] Nakajima K. Equilibrium phase diagrams for Stranski-Krastanov structure mode of III–V ternary quantum dots //Japanese journal of applied physics. – 1999. – T. 38. – №. 4R. – C. 1875.
- [Nevedomskii, 2009] Nevedomskii V. N. et al. GaAs structures with InAs and As quantum dots produced in a single molecular beam epitaxy process //Semiconductors. – 2009. – T. 43. – №. 12. – C. 1617-1621.
- [Nevedomskii, 2011] Nevedomskii V. N. et al. Electron microscopy of GaAs Structures with InAs and as quantum dots //Semiconductors. – 2011. – T. 45. – №. 12. – C. 1580-1582.
- [Nevedomskiy, 2013] Nevedomskiy V. N. et al. Electron microscopy of GaAs-based structures with InAs and As quantum dots separated by an AlAs barrier //Semiconductors. – 2013. – T. 47. – №. 9. – C. 1185-1192.
- [Nevedomskiy, 2014] Nevedomskiy V. N. et al. Effect of local structural defects on the precipitation of as in the vicinity of InAs quantum dots in a GaAs matrix //Semiconductors. – 2014. – T. 48. – №. 11. – C. 1539-1543.
- [Nishi, 1999] Nishi K. et al. A narrow photoluminescence linewidth of 21 meV at 1.35  $\mu\text{m}$  from strain-reduced InAs quantum dots covered by In<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As grown on GaAs substrates //Applied Physics Letters. – 1999. – T. 74. – №. 8. – C. 1111-1113.
- [Niu, 2001] Niu Z. et al. Modification of emission wavelength of self-assembled In (Ga) As/GaAs quantum dots covered by In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As ( $0 \leq x \leq 0.3$ ) layer //Journal of crystal growth. – 2001. – T. 227. – C. 1062-1068.
- [Pastor, 2012] Pastor A. A., Serdobintsev P. Y., Chaldyshev V. V. Experimental evaluation of the carrier lifetime in GaAs grown at low temperature //Semiconductors. – 2012. – T. 46. – №. 5. – C. 619-621.
- [Pastor, 2013] Pastor A. A. et al. Effect of annealing on the nonequilibrium carrier lifetime in GaAs grown at low temperatures //Semiconductors. – 2013. – T. 47. – №. 8. – C. 1137-1140.
- [Petrov, 2008] Petrov M. Y. et al. Effect of thermal annealing on the hyperfine interaction in InAs/GaAs quantum dots //physical review B. – 2008. – T. 78. – №. 4. – C. 045315.
- [Pryor, 1998] Pryor C. Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations //Physical Review B. – 1998. – T. 57. – №. 12. – C. 7190.
- [Rastelli, 2001] Rastelli A., Kummer M., Kanel H. Condensed Matter: Structure, etc.- Reversible Shape Evolution of Ge Islands on Si (001) //Physical Review Letters. – 2001. – T. 87. – №. 25. – C. 256101-256101.
- [Di, 2019] Di Russo E. et al. Compositional accuracy in atom probe tomography analyses performed on III-N light emitting diodes //Journal of Applied Physics. – 2019. – T. 126. – №. 12. – C. 124307.

- [Ruvimov, 1995] Ruvimov S. et al. Structural characterization of (In, Ga) As quantum dots in a GaAs matrix //Physical Review B. – 1995. – T. 51. – №. 20. – C. 14766.
- [Salewski, 2017] Salewski M. et al. Photon echoes from (In, Ga) As quantum dots embedded in a Tamm-plasmon microcavity //Physical Review B. – 2017. – T. 95. – №. 3. – C. 035312.
- [Sautter, 2020] Sautter K. E., Vallejo K. D., Simmonds P. J. Strain-driven quantum dot self-assembly by molecular beam epitaxy //Journal of Applied Physics. – 2020. – T. 128. – №. 3. – C. 031101.
- [Sears, 2006] Sears K. et al. A transmission electron microscopy study of defects formed through the capping layer of self-assembled In As/Ga As quantum dot samples //Journal of Applied Physics. – 2006. – T. 99. – №. 11. – C. 113503.
- [Shields, 2010] Shields A. J. Semiconductor quantum light sources //Nanoscience And Technology: A Collection of Reviews from Nature Journals. – 2010. – C. 221-229.
- [Shimogishi, 2002] Shimogishi F. et al. Hopping conduction in GaAs layers grown by molecular-beam epitaxy at low temperatures //Physical Review B. – 2002. – T. 65. – №. 16. – C. 165311.
- [Sokolov, 2016] Sokolov P. S. et al. Reconstruction of nuclear quadrupole interaction in (In, Ga) As/GaAs quantum dots observed by transmission electron microscopy //Physical Review B. – 2016. – T. 93. – №. 4. – C. 045301.
- [Simmonds, 2010] Simmonds P. J., Lee M. L. Tensile strained island growth at step-edges on GaAs (110) //Applied Physics Letters. – 2010. – T. 97. – №. 15. – C. 153101.
- [Songmuang, 2003] Songmuang R., Kiravittaya S., Schmidt O. G. Shape evolution of InAs quantum dots during overgrowth //Journal of Crystal Growth. – 2003. – T. 249. – №. 3-4. – C. 416-421.
- [Stevenson, 2006] Stevenson R. M. et al. A semiconductor source of triggered entangled photon pairs //Nature. – 2006. – T. 439. – №. 7073. – C. 179-182.
- [Stier, 1997] Stier O., Bimberg D. Modeling of strained quantum wires using eight-band  $k \cdot p$  theory //Physical Review B. – 1997. – T. 55. – №. 12. – C. 7726.
- [Stier, 1999] Stier O., Grundmann M., Bimberg D. Electronic and optical properties of strained quantum dots modeled by 8-band  $k \cdot p$  theory //Physical Review B. – 1999. – T. 59. – №. 8. – C. 5688.
- [Stier, 2002] Stier O. Theory of the electronic and optical properties of ingaas/gaas quantum dots //Nano-Optoelectronics. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2002. – C. 167-202.
- [Stranski, 1937] Stranski I. N., Krastanow L. Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander //Monatshefte für Chemie und verwandte Teile anderer Wissenschaften. – 1937. – T. 71. – №. 1. – C. 351-364.



- [Streb, 1996] Streb D. et al. Optical characterization of low temperature grown GaAs by transmission measurements above the band gap //Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena. – 1996. – T. 14. – №. 3. – C. 2275-2277.
- [Sun, 2010] Sun Y. Metal nanoplates on semiconductor substrates //Advanced Functional Materials. – 2010. – T. 20. – №. 21. – C. 3646-3657.
- [Tatebayashi, 2001] Tatebayashi J., Nishioka M., Arakawa Y. Over 1.5  $\mu\text{m}$  light emission from InAs quantum dots embedded in InGaAs strain-reducing layer grown by metalorganic chemical vapor deposition //Applied Physics Letters. – 2001. – T. 78. – №. 22. – C. 3469-3471.
- [Teichert, 2002] Teichert C. Self-organization of nanostructures in semiconductor heteroepitaxy //Physics Reports. – 2002. – T. 365. – №. 5-6. – C. 335-432.
- [Torchynska, 2018] Torchynska T. et al. Emission and HR-XRD study of MBE structures with InAs quantum dots and AlGaInAs strain reducing layers //Superlattices and Microstructures. – 2018. – T. 124. – C. 153-159.
- [Tu, 2007] Tu Y., Tersoff J. Coarsening, mixing, and motion: the complex evolution of epitaxial islands //Physical review letters. – 2007. – T. 98. – №. 9. – C. 096103.
- [Törmä, 2014] Törmä P., Barnes W. L. Strong coupling between surface plasmon polaritons and emitters: a review //Reports on Progress in Physics. – 2014. – T. 78. – №. 1. – C. 013901.
- [Ustinov, 1999] Ustinov V. M. et al. InAs/InGaAs quantum dot structures on GaAs substrates emitting at 1.3  $\mu\text{m}$  //Applied physics letters. – 1999. – T. 74. – №. 19. – C. 2815-2817.
- [Vahala, 2003] Vahala K. J. Optical microcavities //nature. – 2003. – T. 424. – №. 6950. – C. 839-846.
- [Michaelis, 2010] Michaelis de Vasconcellos S. et al. Coherent control of a single exciton qubit by optoelectronic manipulation //Nature Photonics. – 2010. – T. 4. – №. 8. – C. 545-548.
- [Vorobiev, 2013] Vorobiev Y. V., Torchynska T. V., Horley P. P. Effect of aspect ratio on energy of optical transitions in a pyramid-shaped quantum dot //Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. – 2013. – T. 51. – C. 42-47.
- [Waddill, 1989] Waddill G. D. et al. Ag and Co cluster deposition on GaAs (110): Fermi level pinning in the absence of metal-induced gap states and defects //Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena. – 1989. – T. 7. – №. 4. – C. 950-957.
- [Walther, 1995] Walther T., Humphreys C. J. The limitations of pattern recognition and displacement measurement techniques for evaluating HREM images of strained

- semiconductor interfaces //CONFERENCE SERIES-INSTITUTE OF PHYSICS. – IOP PUBLISHING LTD, 1995. – Т. 147. – С. 103-106.
- [Walther, 2001] Walther T. et al. Nature of the Stranski-Krastanow transition during epitaxy of InGaAs on GaAs //Physical Review Letters. – 2001. – Т. 86. – №. 11. – С. 2381.
- [Wang, 2005] Wang Q. Q. et al. Decoherence processes during optical manipulation of excitonic qubits in semiconductor quantum dots //Physical Review B. – 2005. – Т. 72. – №. 3. – С. 035306.
- [Wolde, 2017] Wolde S. et al. Noise, gain, and capture probability of p-type InAs-GaAs quantum-dot and quantum dot-in-well infrared photodetectors //Journal of Applied Physics. – 2017. – Т. 121. – №. 24. – С. 244501.
- [Wu, 2012] Wu J. et al. Strong interband transitions in InAs quantum dots solar cell //Applied Physics Letters. – 2012. – Т. 100. – №. 5. – С. 051907.
- [Wu, 2015] Wu J. et al. Quantum dot optoelectronic devices: lasers, photodetectors and solar cells //Journal of Physics D: Applied Physics. – 2015. – Т. 48. – №. 36. – С. 363001.
- [Xie, 1995] Xie Q. et al. Vertically self-organized InAs quantum box islands on GaAs (100) //Physical review letters. – 1995. – Т. 75. – №. 13. – С. 2542.
- [Yuan, 2002] Yuan Z. et al. Electrically driven single-photon source //science. – 2002. – Т. 295. – №. 5552. – С. 102-105.
- [Zhang, 2006] Zhang W., Govorov A. O., Bryant G. W. Semiconductor-metal nanoparticle molecules: Hybrid excitons and the nonlinear Fano effect //Physical review letters. – 2006. – Т. 97. – №. 14. – С. 146804.
- [Zhou, 2016] Zhou W., Coleman J. J. Semiconductor quantum dots //Current Opinion in Solid State and Materials Science. – 2016. – Т. 20. – №. 6. – С. 352-360.
- [Zielke, 2014] Zielke R., Maier F., Loss D. Anisotropic g factor in InAs self-assembled quantum dots //Physical Review B. – 2014. – Т. 89. – №. 11. – С. 115438.
- [Командин, 2019] Командин Г. А. и др. Электродинамические характеристики alpha-лактозы моногидрата в терагерцовом диапазоне //Оптика и спектроскопия. – 2019. – Т. 126. – №. 5. – С. 596-603.
- [Торопов, 2017] Торопов Н. А. и др. Поглощение и фотолюминесценция эпитаксиальных квантовых точек в ближнем поле серебряных наноструктур //Оптический журнал. – 2017. – Т. 84. – №. 7. – С. 37-40.