



物理所“分子量子点”多尺度定量模型研究取得新进展

文章来源: 物理研究所

发布时间: 2013-01-29

【字号: 小 中 大】

半导体量子点和复杂纳米结构,对于探索纳米量子器件的基本物理特性和应用具有重要意义,因此在过去几十年中受到广泛关注。生长半导体纳米结构的一个重要方法是异质外延生长。纳米结构的生长受到了外延薄膜与基底晶格失配引起的应变/应力调制,通过对基底的模板化处理,可以调制外延薄膜的应变/应力分布,从而调制量子点的生长,得到空间分布有序、尺寸均一的量子点阵列。

在过去几年中,中科院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室(筹)高鸿钧研究组对量子点及复杂纳米结构的生长模型进行了研究[*Phys. Rev. Lett.* 101, 216102(2008)]。他们发现,模板化基底上的自组装量子点的生长位置由量子点表面能与弹性弛豫能之间的竞争决定。他们应用表面弹性格林函数方法计算生长量子点时的弹性弛豫能;在考虑表面能各向异性的基础上,计算了表面能,从而得到了量子点生长的自由能。他们的分析表明:由于表面能各向异性效应和更加有效的弹性弛豫,1)应变岛在模板化基底上的成核较之在平直基底上有很大增强,岛的成核临界尺寸和势垒都更低;2)这两个因素的相互竞争,促使应变岛生长发生在表面的顶区域,或者在表面的谷区域,甚至在斜面上。这个理论解释了大部分现有实验的主要结果,对进一步控制量子点生长的实验有重要指导意义。

最近,高鸿钧研究组与美国犹他大学刘峰教授进行合作,结合前面提到的连续体模型(弹性弛豫能)和第一性原理计算(表面能)的多尺度方法,提出了一个定量的理论模型,研究了一种复杂纳米结构——“分子量子点”(几个量子点被外延薄膜上的坑洞束缚在一起)的成核生长。在这种分子量子点中,外延薄膜上的反金字塔形坑洞由薄膜生长过程中的台阶合并产生。量子点在坑洞旁边的成核生长,可以看做是异相成核过程,而在平直基底上的成核生长可以看做是均相成核过程。以SiGe体系为模型,他们定量研究了 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}/\text{Si}(001)$ 体系中分子量子点的成核生长。实验数据显示岛(量子点)在坑洞旁边的成核临界尺寸和势垒随着坑洞尺寸的增大而急剧减小,但是这种减小是有限的,当坑洞尺寸很大时,临界尺寸最多减小~85%,势垒最多减小~72%(具体数值只对应SiGe体系,其他体系由于结构的不同有差异)。考虑到岛-岛之间排斥作用和岛-坑之间吸引作用的竞争,他们预言了一种岛生长的自限制效应的存在:即岛在长到一定尺寸时,停止各向同性均匀生长,转为沿坑洞边缘伸长生长,并最终于其他岛合并,形成“成熟的”分子量子点。也正是这种自限制效应,使得“成熟的”分子量子点中岛的尺寸与坑的尺寸有线性关系,这个理论结果也解释了实验上发现的岛-坑尺寸的线性关系。该研究中,他们还定量研究了岛-坑相互作用存在下岛的伸长生长,得到的岛的尺寸也与实验数据很好的吻合。他们的理论模型很好地解释了实验上发现的分子量子点的生长特性,同时也对定量研究其他体系的分子量子点以及复杂纳米结构有重要意义。

这项工作得到了国家自然科学基金委、科技部和中国科学院的支持。结果发表在*Phys. Rev. Lett.* 109, 106103 (2012)上。

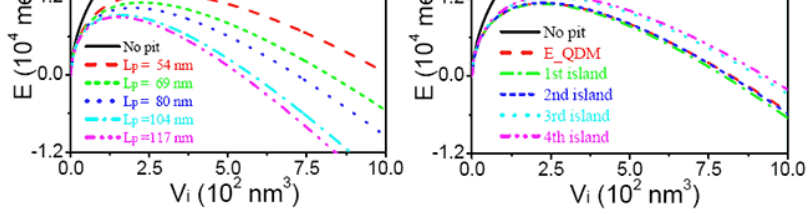


图1: (a) 上面是分子量子点中四个岛在薄膜表面的坑洞周围同时成核生长的示意图, 下面是不同坑洞尺寸下分子量子点中每个岛的总能随岛尺寸的变化。(b) 上面是分子量子点中四个岛依次成核生长的示意图, 下面是依次成核的岛的总能随岛的尺寸的变化。坑洞尺寸设为 $V_p=20$ (约化单位), 已经成核的岛的尺寸限制为 $V_{is}=5$ (约化单位)。

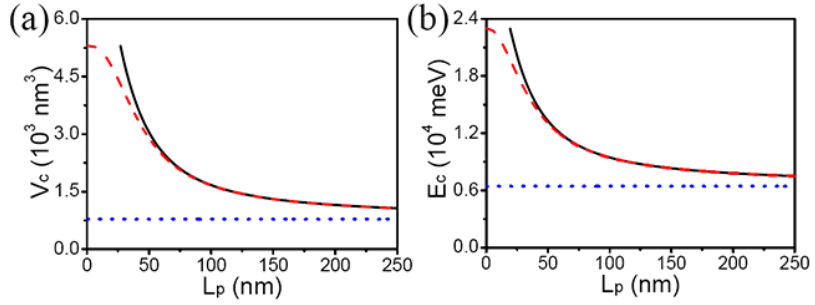


图2: 分子量子点中岛成核的临界尺寸 (V_c) 和势垒 (E_c) 随坑洞尺寸的变化 (黑色实线)。单个岛在坑洞旁边成核的临界尺寸和势垒随坑洞尺寸的变化以红色虚线表示。蓝色点线表示当坑洞尺寸 V_p 远大于岛尺寸 V_i 时的渐近值。