

半导体量子点结构的特性及力学研究进展*

楚海建^{1,2,†} 陈建康³ 王建祥²

¹ 扬州大学水利科学与工程学院, 扬州 225009

² 北京大学工学院力学与空天技术系, 湍流和复杂系统国家重点实验室, 北京 100871

³ 宁波大学工学院, 宁波 315211

摘要 量子点结构具有独特而优异的光学和电学等性能, 是当前国际研究的热点问题之一. 量子点异质结构中的弹性场会对量子点结构的制备、加工及其光学和电学等物理性能产生重要影响. 本文以此为背景, 从低维量子限制系统所遵循的量子力学规律及其特点、半导体量子点的物理性能及表征、半导体量子点制备技术等方面较为全面地介绍半导体量子点结构的研究进展, 并着重介绍在半导体量子点结构的力学研究方面以及力学性能与物理性能耦合研究等方面的一些研究成果.

关键词 量子点, 初始失配应变, 连续介质力学, 有限元, 原子模拟

1 引言

对半导体技术的深入研究是当今世界信息技术飞速发展的基础, 固体电子器件的小型化和高的集成度一直是信息产业发展取得成功的关键^[1,2]. 在过去的 30 年间, 以存储技术为代表的半导体集成电路遵循著名的 Moore 定律, 即微处理器芯片的电路密度, 以及它潜在的计算能力, 每隔 18 个月翻一番. 若继续按此速度发展下去, 在不久的将来, 现代晶体管的尺寸将不可避免地进入纳米尺度. 虽然纳米结构可以简单地看作当前驱动微电子和计算机工业发展的半导体微米工程向更小尺度的自然且必然的延伸, 但是, 它不是简单地向着小型化继续的迈进. 在纳米尺度结构中有大量新奇的物理、化学和生物等现象和效应^[1]. 这种新型的纳米现象和效应不仅对半导体制造技术提出了新的更高的要求, 同时也给理论工作者带来了新的机遇和挑战.

近些年来, 对低维量子限制系统, 尤其是对半导体量子点结构的研究, 一直是国际研究的热点问题之一^[3~15], 同时也代表了现代凝聚态物理的发展趋势. 本文所指半导体微结构是指所谓的二维量子阱, 一维量子线和(准)零维量子点 3 种结构(图 1). 量子阱结构是指在器件的某一方向尺寸很小, 进入纳米

量级, 载流子(电子、空穴、激子)在此方向上受到量子限制, 其能量是分立的, 而载流子在另外两个方向上, 能量是连续的, 形成所谓的“二维电子气”(two dimensional electron gas, 2DEG), 称为一维量子限制系统. 一维量子线是指载流子在两个方向上受到量子限制, 在这两个方向上能量是量子化的, 而在另外一个方向上, 能量是连续的, 所以又称为二维量子限制系统. 而量子点结构则是指其尺寸在空间 3 个维度上都小于电子波长, 使得载流子的运动在 3 个维度上都受到限制, 因此载流子的能量是量子化的, 是三维量子限制系统. 低维量子限制系统的这些特点, 尤其是量子点能量的完全量子化特性, 使其具有独特而优异的光学、电学和磁学等物理性能, 从而构成了量子器件和电子电路的基础, 在纳米电子学、光电子学、光子和量子计算、生命科学以及国防科技等领域有着重要的应用前景. 因此, 半导体量子点的理论与实验研究已成为半导体技术研究的前沿领域^[3,4,6].

此外, 作为固体力学发展的一个新的重要分支, 纳米力学呈现出加速发展的态势^[16,17]. 国际理论与应用力学联合会(IUTAM)2004 年在香港举办了“在微纳米尺度下材料和结构行为的尺度效应”学术研讨会; 2005 年在北京举办了“纳米结构材料的力学行为和微观力学”学术研讨会^[17]. 2004 年, 中国科

收稿日期: 2006-12-25, 修回日期: 2007-06-06

* 国家自然科学基金项目(10602050, 10525209)和扬州大学科研启动基金(3009)资助项目

† E-mail: hjchu@pku.edu.cn; hjchu@pku.org.cn

学院力学研究所等单位在北京举办了“材料的力学行为及尺度效应学术会议”。纳米力学所涉及的诸多问题与物理学和材料学是密不可分的,除了需要考虑传统连续介质力学中诸如弹性、塑性、断裂和稳定性等问题外,往往还需要采用分子动力学和量子计算等物理学方法分析纳米尺度下的微观力学行为,如位错的形成和发射等。纳米结构的力学行为还与其制作工艺、材料组成及界面等因素紧密关联。从结构尺度的角度来看,半导体量子点结构属于纳米力学研究的范畴。据统计,在凝聚态物理的研究中,大多数的学术论文都与半导体材料有关,因此开展半导体微结构的力学研究十分必要和重要。

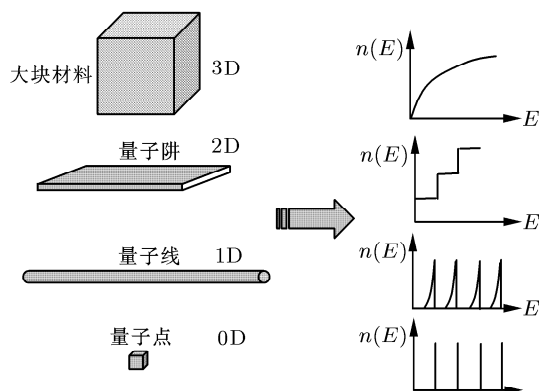


图1 尺度对半导体材料电子态密度的影响示意图^[8].
 $n(E)$ 为电子态密度, E 为电子能量。

本文将从4个方面阐述量子点结构的研究背景和研究进展。首先,简要概述半导体微结构所遵循的基本原理及其特点。其次,概述半导体量子点的性能及其应用。第3,概述半导体量子点结构的制备技术和表征方法。最后,着重介绍半导体微结构的力学研究及力学与物理性能耦合的研究进展。

2 半导体微结构的基本原理

传统电子器件的工作原理和理论基础是以 Boltzmann 输运方程为基础的^[1]。其基本假设(1) 散射过程是局部的,并且在空间的单一点发生;(2) 散射是瞬态的;(3) 散射非常弱,而且场很弱;(4) 仅考虑时间尺度小于电子平均自由时间的事件。简言之,所研究的结构中势能在空间和时间两个方面都是缓变的。但当电子器件的微结构单元进入纳米尺度时,即尺寸小于电子德布罗意波长时,必须考虑载流子的波动性,传统的理论将不再适用或必须作出调整。此外,从发光器件的角度来看,决定其发光性能的主要因素是材料的能带结构。如发光

波长 λ 与能带间隙 E_g 之间的关系为^[18]

$$\lambda = 1.24/E_g \quad (1)$$

式中 λ 的单位为 nm, E_g 的单位为 KeV。

当材料进入纳米尺度时,材料的能带会发生偏移,能带间隙将发生改变,因此发光器件的性能与微结构的尺度存在紧密的关系。但无论器件微结构单元的尺度如何,包括载流子(电子或空穴)在内,微结构单元体系的状态或分布都必须遵循量子力学规律,即满足 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad (2)$$

若体系状态不随时间变化,则满足定态 Schrödinger 方程,即

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (3)$$

式中 \hat{H} 为体系的 Hamilton 算符, ψ 为波函数或称为体系的本征函数, E 为体系的能量本征值,体系的状态显然取决于其相应的 Hamilton 算符。这里的体系是指由微结构内大量离子与电子组成的一个系统。根据 Born-Oppenheimer 绝热近似 (the Born-Oppenheimer approximation) 可将电子与离子的运动分离,从而得到多电子体系的 Schrödinger 方程

$$\hat{H}_e \psi_e = E_e \psi_e \quad (4)$$

式中 \hat{H}_e 、 ψ_e 、 E_e 分别代表多电子体系的 Hamilton 算符、波函数和能量本征值。

可以明确的是,对于多体问题解析求解是不可能的。因此,公式(4)的求解只能通过数值计算进行。事实上,有多种求解公式(4)的近似方法^[19~23],如:准自由电子理论、紧束缚理论、有效质量近似理论、Hartree-Fock 理论、Roothaan-Hall 方法、密度泛函理论等。

在上述方法中,密度泛函理论由于其数值计算的规模及所需的时间在实际操作上可以接受,其计算结果与实验结果符合得较好,而且能够用于计算杂质和表界面等能态的分析,因此已成为量子计算中广泛采用的一种。

前面所讲述的是固体物理中的一般性原理,适用于任何结构体系。半导体材料的晶体结构通常为立方晶格或六角晶格点阵结构,即金刚石结构、闪锌矿结构或纤锌矿结构。一般可组成半导体微结构的材料如表1所示,在这些材料中有些材料为间接带隙半导体,有些为直接带隙半导体。如最为常用的半导体材料 Si 是间接带隙半导体。间接带隙半导体作为发光材料使用时,载流子的跃迁,伴随着声子的吸收或发

射, 从而影响发光效率. 将量子力学基本原理运用于具体的半导体微结构时, 有如下几点需要注意:

(1) 组成微结构的不同材料各自特性对势场的影响. 不同材料的晶体结构其固有的周期性势场是不同的, 因此微结构的存在使半导体晶体结构中的周期性势场被破坏.

(2) 应变能对势场的影响. 由于微结构与基体之间的晶体失配、热失配, 结构中的势场将发生变化, 而变化的大小与失配所产生的弹性场有直接关系.

(3) 微结构界面的影响. 由于微结构足够小, 使得界面在体系中的作用增强. 因此, 界面结构及其特性的分析对正确了解半导体微结构电子器件的光学、

电学等性能有重要意义.

从上面的分析中可以看出, 在采用量子力学方法计算半导体量子点结构的物理性能时非常关键的问题是如何精确的确定其结构内的势场. 杨卫等^[16,17]阐述了纳米结构中应变量子效应计算的一般方法和思路, 将影响能带结构的势场近似为产生基础能带的势场与应变效应所产生的附加势场的叠加. 张永伟和王自强^[24]采用原子间多体势函数以及真实的三维原子尺度的几何模型对原子尺度的动力学过程进行了模拟, 比较真实地反映了材料的微观动力学过程. 尽管他们的研究不是特别针对量子点结构的, 但所采用的方法或思想可以在量子点结构的能带计算中予以借鉴.

表 1 主要半导体量子阱、量子线和量子点材料^[9]

族	量子阱材料	量子线材料	量子点材料
IV		Si, 碳纳米管	Si, Ge
III-V	AlGaAs, GaInP, InGaAs, InGaAsP, InGaN, GaInAsSb, InAsP, GaInNAs, GaN	GaAs, InAs, GaN, InGaAs, AlGaAs, (GaAs) ₄ (AlAs) ₂ , (GaAs) ₅ (AlAs) ₅	GaAs, GaN, GaSb, InAs, InP, InGaAs, AlGaAs, InAlAs, InGaN
II-VI	ZnCdSe, CdMnTe		ZnTe, ZnSe, ZnS, CdSe, ZnO, CdTe
IV-IV	SiC	SiC	SiC, SiGe
IV-V		α -Si, N ₄ , β -Si ₃ N ₄	
IV-VI			PbSe

对于半导体微结构, 如量子点、量子线和量子阱结构, 其电子态密度如图 1 所示. 图 1 中分别给出了各种不同结构的电子态密度与电子能量的关系, 表明: (1) 对于大块材料, 电子态密度是连续分布的; (2) 对于量子阱结构, 电子能量在量子阱内是连续的, 而在垂直于阱的方向上发生分裂; (3) 量子线结构的能态在两个方向上受限, 是分立的, 而沿着量子线方向, 电子能量则是连续的; (4) 对于量子点结构, 其能态结构与原子的能态结构非常相似, 其电子态密度为一系列的分立函数, 在所有方向上都发生了分裂. 量子点结构尺度小, 且能量又是完全量化的, 其行为类似于原子的行为, 因此量子点结构又被称为“人工原子”^[13].

3 半导体量子点性能及其应用

正如前文所述, 半导体量子点结构对其中的载流子(如电子、空穴)有强三维量子限制作用. 这一特点使其表现出一系列新颖的物理特性, 如具有量子尺寸效应、量子隧穿效应、量子干涉效应、库仑阻塞效

应、非线性光学效应等^[1,3,6], 下面作些简单介绍.

3.1 电子态的分立特性

量子点的电子态是研制新型量子点器件和电路的物理基础, 所以对量子点电子态的了解有着重要的意义. 通过将势阱作平底势阱的理想化假设, 可以解析地计算得到一些特殊形状量子点的本征能量、波函数及其态密度, 如箱形量子点、球形量子点以及圆柱形量子线等. 结果表明: 量子点结构的电子能量在 3 个维度上都是量子化的, 量子化能级间距与该方向的特征长度的平方成反比, 随着该方向的尺寸减小, 该方向量子化能级间距增大, 量子化效应更加明显^[3]. 量子点中电子态密度的分立特性, 类似于原子的分立光谱. 但是上述的结论是建立在理想势阱假设的基础上, 实际半导体量子点的能态计算受多种因素的影响, 如实际结构形貌特征、材料的组份的分布、界面缺陷等.

3.2 量子干涉特性

根据量子力学原理, 载流子既具有粒子性也具有

波动性. 在传统的电子器件中, 载流子输运过程遵循 Boltzmann 输运方程, 在载流子运动过程中将发生碰撞, 从而表现为粒子性. 但量子点的尺寸可以与电子的德布罗意波波长 (100Å 量级) 相比拟或者更小, 因此在处理电子输运问题时必须考虑其波动性, 电子的运动用电子波函数来表示. 电子从不同路径通过样品时发生弹性散射的情况不同, 相位的累积也不同. 假设某时刻电子通过样品时只有两条路径, 根据态叠加原理, 由两个波函数叠加得到的几率分布为 [3]

$$\vartheta = A_1^2 + A_2^2 + A_1 A_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (5)$$

式中 A_1 和 A_2 为相应波的波幅, $\varphi_1 - \varphi_2$ 为两列波的相位差. 当样品的尺寸远大于状态相干长度时, 电子会遭受多次散射, 上式最后一项的平均值为零; 如果样品的尺寸与相位相干长度同一量级, 交叉项就会有一比值, 这样就会产生量子干涉现象 [3]. 基于量子干涉效应可以制备量子干涉晶体管等器件 [3,25]. 由于一个具有两种状态的系统可以看作是一个“二进制”的量子比特 (quantum bit), 而量子点的能级具有基态和激发态, 量子点系统又具有量子叠加性、相干性、纠缠性等, 所以量子点的能级可以制成量子计算的基本单元——量子比特 [3,26~28].

3.3 库仑阻塞效应

库仑阻塞效应可以从两个方面来理解, 一是直接从量子力学基本方程出发, 当两个电子同时处于量子点内时, 其对应的能量本征值将远大于两电子分离时体系所对应的能量, 也就是说, 量子点处于单电子态的几率要远高于两个电子同时处于量子点内的几率. 另一方面, 从传统的电学角度看, 量子点与其所相关电极将形成一定的电容, 通常这些电容是非常小的, 约为 10^{-18} F 量级, 当量子点中的电荷改变一个电子电量时, 电势能的变化量将会达到几十个 meV [29], 该电势能远大于电子热运动的能量. 因此, 该静电能将有效阻止随后的第 2 个电子进入同一量子点. 基于库仑阻塞效应可以制造多种量子器件, 如单电子器件和量子点旋转门等 [3,29,30].

3.4 量子点的应用

理论分析表明, 基于三维受限量子点的分立特性的量子器件, 以其独特优异的电学、光学性能和极低功耗, 在纳米电子学、光电子学、生命科学、量子计算以及军事国防等领域有着极其广泛的应用前景, 具体可运用在量子点激光器、量子点红外探测器、单光子光源、单电子器件和量子计算机等方面. 瞬时超大功率激光器, 可以用于拦截或摧毁飞行器 (如, 导弹、飞机、卫星等), 是一种定向能武器, 对国防建设有重要意义. 因此, 各大国都对此展开了深入研究.

关于量子点的应用, 详细的论述可参阅相关综述文章 [4, 10, 30, 31].

4 量子点结构生长技术及其表征方法

理论上很早就预言, 当材料尺度小于一定尺寸时, 可以实现强的三维量子限制 [18], 使得载流子的能量在 3 个维度上均发生分裂, 从而使材料的电学和光学性能发生明显变化. 但直到 20 世纪 80 年代中后期才从实验上制备了具有这种微结构的材料, 并发展了多种不同的制备方法.

4.1 微结构生长与精细加工相结合的方法

这里涉及的精细加工技术有: 光子刻蚀技术、高能粒子 (电子束、离子束) 刻蚀技术、化学束刻蚀技术等. 此方法又分为“自上而下”和“自下而上”两种类型. 1986 年, Kash 等 [32] 首先利用分子束外延技术 (molecular beam epitaxy, MBE) 生长 GaAs/AlGaAs 量子阱, 然后对外延层进行电子刻蚀, 形成微结构, 成功制备了 GaAs/AlGaAs 量子点结构. 同年, Cibert [33] 使用同样的方法制备了此种结构. 此种方法的特点是先生长外延层再进行精细加工, 量子点的形成属于“自上而下”的模式. 但由于刻蚀加工过程带来的损伤和污染给量子点的光学和电学性质带来了极大的劣化, 因而此种方法未能取得大的进展. 所谓“自下而上”方式则是先通过电子蚀刻、离子束曝光等方式在衬底上做成图形, 形成优先成核位置, 再在衬底上生长外延层, 从而形成量子点. 此种方法的缺点为:

(1) 由于受到光的衍射效应的制约, 光子刻蚀技术所能达到的光刻尺度约为 200nm 线宽, 进一步减小此指标, 需要提高光子能量、减小波长, 这就对光源提出了更高的要求;

(2) 采用高能离子束刻蚀, 粒子在撞击表面时, 可能会在图形衬底或量子点表面产生较大的缺陷, 影响量子点的质量.

4.2 应变自组装技术

应变自组装技术适用于晶格失配较大的异质材料, 基于 S-K 生长模式, 首先以二维方式在衬底上外延生长形成浸润层, 然后在浸润层内应变能的驱动下进一步生长形成量子点, 从而释放层内过高的应变能 [5]. 利用应变自组装技术还可以制备多层量子点结构, 在生长此种多层结构过程中, 当前层量子点的生长位置和尺寸受到已生长层中量子点所形成的弹性场的影响或控制, 是一种层间有序结构. 实验上可采用原子层外延 (atomic layer epitaxy, ALE)、分子束外延 (molecular beam epitaxy, MBE) 和金属有机

物化学气相沉积 (metal organic vapor chemical deposition, MOCVD) 等制备技术. 1990 年, Eaglesham 等^[34] 用应变自组装技术制备了无位错的 Ge/Si 量子点结构, 从而引起了以此种技术制备各种量子点结构的热潮, 并且该方法仍是当前量子点结构制备研究的热点之一^[35~37]. 此方法的优点为: (1) 可以生长出高密度的量子点; (2) 可以形成多层结构, 并且该结构往往是层间有序的; (3) 工艺较简单, 适用于大规模生产. 此方法的缺点为: (1) 量子点的尺寸不均一; (2) 量子点的空间分布具有一定的随机性.

应变自组装技术生长量子点的上述两个缺点, 严重影响了量子点特性的发挥, 不同尺寸量子点结构的量子效应不同, 单个量子点分立的能态, 在总体上却可能体现为准连续分布的情形, 在光致发光谱中表现为谱峰半高宽较宽, 单色性差等特点.

4.3 精细生长衬底技术

为了克服应变自组装的上述缺点, 人们提出可以采用精细生长图形衬底的办法, 设计优先成核位置, 从而控制量子点的生长. 这种方法不同于采用光刻技术制作量子点模版, 而是采用化学的方法直接生长形成表面图形, 如制备的多孔硅可作为衬底使用, 这样就避免了光刻技术的弱点.

Birudavolu 等^[38] 在多孔硅衬底上首先生长一层 GaAs, 再采用金属有机化学沉积的方法 (MOCVD) 生长 InAs 量子点, 通过扫描电镜 (scanning electron microscope, SEM) 可以清楚的看出量子点分布较为均匀, 其金字塔型量子点的基底尺寸在 30~40 nm, 通过对其光致发光 (photoluminescence, PL) 谱的测量与自组装量子点结构以及不规则量子点结构的对应结果进行了比较, 可以发现, 其 PL 谱峰显著高于后两者, 而且谱峰半高宽 (full wave at half maximum, FWHM) 也变得较窄.

这种方法的优点是明显的, 可以生长出空间分布均匀, 尺寸比较均一的量子点结构, 是一种极有发展前途的方法. 此技术的关键是制备出形状规则的图形衬底.

4.4 液态生成法

前面几种方法都是通过生成源气体, 然后在衬底表面吸附形成所谓的外延层, 而溶液生成法则不同, 有所谓的液相外延法, 还有通过化学过程在溶液中直接生成的. Li 等^[39] 在表面活性剂衬底 (surfactant template) 上, 经过生成溶液, 形成凝胶 (sol-gel procedure), 拆除衬底, 以及退火等过程, 制备了多种不同的含纳米晶粒的多孔材料. 另外, 还可以通过溶液生成法形成多层芯壳结构^[40,41], Chan^[40] 等制备了粒径分布比较单一的 CdSe/ZnS 和 CdS/ZnS 芯

壳结构纳米晶粒. 其特点在于壳体结构中存在发光基团, 可应用于生物标记、流体可视化等.

除了以上文献报道中出现较多的制作方法外, 还有其它的一些方法, 比如离子注入 - 退火法等.

4.5 量子点结构的检测与表征方法

随着材料的特征尺寸减小到纳米量级范围, 传统的基于反映体材料宏观平均性质的实验技术往往不再适用, 需要发展新的纳米尺度的测试分析技术. 量子点结构及其性能的表征主要包括量子点结构形貌检测、组份测量以及光学与电学性质的测量等.

在形貌检测方面, 目前多使用扫描电子显微镜 (SEM)、原子力显微镜 (atom force microscope, AFM) 和扫描隧道显微镜 (scanning tunneling microscope, STM) 等设备对其进行检测^[3]. 这些不同的测量技术都可达到很高的精度, 但需要注意的是, 各种方法所依据的微观物理机制可能是不同的. 一般地, 各种测量方法并不是对所检测对象形貌的直接拍摄. 对用于断面分析的 SEM 实验, 应注意断面加工过程对量子点原生结构的影响; AFM 针尖的尺寸形状及控制装置对测量结果有很大影响, 必须进行误差分析^[42,43]; STM 图像所反映的不是精确的样品表面原子的实际形貌, 而是原子实际位置与表面电子局域态密度形成隧穿电流的结果^[3,18]. 此外, 量子点表面的晶体学特征, 可通过 X 射线衍射和高能电子衍射 (reflection high energy electron diffraction, RHEED) 等方法来了解.

在组份检测方面, 可借助 X 射线衍射、STM 截面分析、高精度透射电子显微术 (high resolution transmission electron microscope, HRTEM) 以及低能电子显微术 (low energy electron microscope, LEEM) 等进行研究^[3]. 目前, 对量子点结构的组份的实验测量及理论预测或模拟也是量子点研究的热点问题之一^[44~72]. 如: 在 Ge/Si 异质量子点结构中, Ge 原子能够扩散到 Si 中 3 个原子层^[50,52] 或 4 个原子层^[53,54]. Werner 等^[47] 使用透射电镜 (transmission electron microscope, TEM) 在研究 InAs/GaAs 量子点结构的组份分布时, 发现 In 组份沿生长方向从浸润层内的 20% 上升到量子点上部的 40%. 实验和理论研究均表明, 量子点结构内组份是不均匀的, 具体的组份分布受到制备条件的诸多因素的影响, 如组成量子点结构的材料自身的特性、生长的温度、生长室的气压以及生长速率等. 通过形貌与组份测量还可以发现量子点结构中可能存在的缺陷, 如: Chaldyshev 等^[73] 通过实验在 GaAs 表面的 Ga-Sb 簇周围观测到了明显的位错环, 并通过应变能的变化解释了产生位错环的机理. Lenz^[74] 还报道量子点生长过程中

出现了孔洞的现象.

在光学性质检测方面, 光致发光 (PL) 和阴极荧光 (cathodoluminescence, CL) 技术常用来表征量子点的光学性质 [3,75,76]. 量子点光谱实验的测量结果, 如谱峰和谱峰半高宽与量子点的质量, 包括其形状是否一致, 空间分布是否均匀等因素有关. 一般地, 如果量子点形状相同、大小一致、空间分布均匀, 则其谱峰高、谱峰半高宽窄, 有利于形成高质量的单色光. 如: Kim 等 [75] 利用金属有机化学沉积 (MOCVD) 的方法在 ZnS 衬底上制备了具有不同缓冲层厚度的 ZnSe 量子点, 通过测量 PL 谱, 发现不同缓冲层厚度对 PL 谱有着非常明显的影响, 随着厚度的增加, PL 谱的峰值出现明显的蓝移. 此外, 量子点电学性能的测试可通过构建恰当的电路来进行, 具体的评述可参见文献 [3].

以上对量子点结构的检测与表征方法进行了简要的概述. 需要指出的是, 由于量子点结构的不均匀性, 即在同一条件下制备的量子点的大小是变化的, 形状往往也不一致, 空间分布也不均匀, 各量子点的组份也有可能是不一样的, 在应变较大的情况下还伴随着缺陷的存在, 所以测量得到的光学或电学效应是多种因素的综合效果, 往往不能认为是哪一个量子点特有的; 此外, 尽管现代测量技术已经取得很大进展, 但是在实际使用和分析时, 还应当注意其可靠性.

5 量子点结构的力学研究进展

5.1 半导体材料的物理性能与力学性能的耦合

从晶体结构来看, 半导体材料一般为金刚石结构、闪锌矿结构或纤锌矿结构. 如作为电子工业大量使用的硅材料中的 Si 原子与其周围的 4 个原子形成所谓的 SP³ 杂化, 从而形成正四面体结构, 即金刚石结构; GaAs, InAs 等则为闪锌矿结构, 其每个晶格格点上有两个原子; GaN, SiC 等可为纤锌矿结构. 有些半导体材料的晶体结构与其所处的物理状态以及生产工艺密切相关, 如 SiC 具有多态性, 即在一定的温度范围内为闪锌矿结构, 而在另一温度条件下, 可能为纤锌矿结构, 更多的情况则是这两种结构共存于同一材料中. 根据 Neumann 原理 [77], 材料的宏观物理性能, 诸如: 弹性模量, 介质常数, 压电常数等, 具有其晶体结构的一切对称性. 因此材料的力学性能与材料所属的晶体结构密切相关; 另一方面, 材料受到外力的作用也会改变其性能, 其主要表现在:

外力作用可能改变晶体结构的对称性. 在外力作用下, 晶体结构的对称性将不可避免的受到影响, 有时甚至发生畸变. 如对立方晶格的晶体, 只在 [001]

方向上受拉应力作用, 则在此方向上晶格常数将增大, 而在 [010] 和 [100] 方向上, 晶格常数将减小.

如果讨论的或所研究的范围超出小变形的条件, 此时晶体结构将发生变化, 即由立方晶格结构转化为正交晶格结构.

外力作用对能带结构有一定的影响. 如上面所讨论, 由于外力作用, 原子与原子之间的距离发生变化, 从而使得晶体内周期性势场发生变化. 由薛定谔方程可知, 势场的变化必然引起材料的能带结构的变化. 另一方面, 晶格常数发生变化也使得波矢空间的取值发生变化.

高应力将对半导体器件的寿命产生影响. 当器件长期处于高应力下工作时, 容易产生缺陷, 影响器件的性能及其稳定性, 甚至导致失效.

以上分析不仅适用于块体材料, 而且也适用于半导体微结构材料. 由于在异质外延生长量子点过程中, 衬底材料的晶格常数与外延层结构往往并不匹配, 必然在外延层、衬底材料和量子点中产生应力和应变, 这些弹性场的存在必然影响量子点结构材料的对称性和能带结构, 从而对量子点的光学和电学等诸多物理性能产生影响.

5.2 产生应力的原因

一般地, 讨论半导体材料的性能侧重于其电学与光学等物理性能. 在块体材料或在微米尺度以上条件下, 研究人员很少研究力学量 (应力、应变及弹性场) 对其性能的影响, 这主要是由于半导体材料的作用不同于传统固体力学所研究的材料, 即半导体材料一般不作为结构材料来使用, 因此实际使用时无所谓的外加荷载作用, 使得对其传统的力学分析往往失去现实意义. 但当材料尺度进入纳米量级时, 材料内部往往形成特殊的微结构, 而这种微结构正是研究人员所关注的. 这样的微结构即使没有外部荷载作用, 也会由于热失配以及晶格失配等原因在微结构内产生形变, 从而对光学和电学等物理性能产生影响. 因此, 半导体微结构内的弹性场问题引起了人们的关注. 引起量子点结构体内弹性场的因素有:

热失配是引起半导体微结构体内应力的重要因素之一. 量子点微结构的热失配是指由于组成量子点结构的异质材料的热膨胀系数不同, 当发生温度变化时所导致的失配. 根据 Vegard 定律 (即按照化合物中原子数之比来确定其材料常数, 如晶格常数、线胀系数等), 以 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 体系为例, 其初始热失配应变的定义为

$$\varepsilon_0 = x(\alpha_{\text{InAs}} - \alpha_{\text{GaAs}})\Delta T \quad (6)$$

式中 α_{InAs} 和 α_{GaAs} 分别为 InAs 和 GaAs 的热膨胀

系数, ΔT 为温差, x 为 InAs 在量子点内的组份比. 一般地, 不同材料体系的半导体微结构制备时的温度不同; 即使材料体系相同, 不同的制备方法或工艺所要求的温度也不一样. 应变自组装技术制备量子点异质结构往往在较高温度下进行, 而将其设计为器件一般都要在常温进行; 对它的性能进行测试时, 温度则更低, 甚至只有几 K, 前后温差达几百度, 甚至上千度, 由此产生的内应力可达 GPa 量级. 因此在考虑微结构弹性场时热失配是个不可回避的问题.

晶格失配也是引起半导体微结构的重要因素之一. 晶格失配是指组成量子点结构的异质材料的晶格常数不同, 在形成量子点时, 两者要发生变形, 以达到协调一致. 同样以 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 体系为例, 初始失配应变可作如下定义

$$\varepsilon_0 = x \frac{a_{\text{InAs}} - a_{\text{GaAs}}}{a_{\text{GaAs}}} \quad (7)$$

式中 a_{InAs} 和 a_{GaAs} 分别为 InAs 和 GaAs 的晶格常数. 晶格失配广泛存在于半导体超晶格、量子线以及量子点等异质结构中. 应变自组装生长量子点方法正是基于衬底材料与外延层材料间适当的晶格失配诱导产生量子点的, 而量子点的形成正是适当的条件下体系能量趋于最小状态的必然结果. 如在立方晶格 Ge/Si 量子点体系中, 晶格失配为 4.2%, InAs/GaAs 的晶格失配为 7.2%; 在六方晶格 GaN/Sapphire 量子点体系中, 晶格失配达 13.8%. 如此之大的晶格失配不仅诱导了外延生长从二维向三维的转变, 而且往往是大量缺陷产生的直接原因. 研究人员希望能找到一种或几种晶格存在一定失配, 但失配不是很大的两种半导体材料, 这样不但可以制作所需要的量子点微结构, 同时也避免结构中产生过大的应力和过多的缺陷, 但这样的材料很难获得 (当然尽管可能存在这种材料, 但其相应的光电性能可能无法满足设计要求, 而无实际应用价值). 目前, 人们更多的采用多相结构, 如 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, 就是在生长外延层时, 通入适当比例的 In 和 Ga 的源材料, 从而减小 InAs 和 GaAs 之间的晶格失配. 当然这样做还可以通过组份来调节量子点的光学和电学性能, 是能带“裁剪”工程的重要组成部分.

这里定义的初始失配应变的性质与复合材料力学中用来模拟相变等过程引进的“本征应变”(eigen-strain) 相似^[78~81]. 上面所定义的初始失配应变都是针对立方晶格材料体系; 对于非立方晶格材料体系, 如 GaN/SiC 为六角晶系, 由于在不同晶向上晶格常数和热胀系数不同, 其初始失配应变具有各向异性, 可以仿照式 (6) 和式 (7) 给出类似的定义.

半导体材料中的各种缺陷也是产生应力的原因之一. 这些缺陷包括: 点缺陷、面缺陷、体缺陷. 按

照统计力学的观点, 材料中点缺陷即空位 (Schottky defect, 肖脱基缺陷)、填隙原子 (interstitial atom) 是不可避免的^[18]. 另外, 自组装量子点微结构中比较常见的缺陷还有位错. 位错是晶体内部局部区域应力较高所产生的, 是释放过高应变能的一种途径. 这些缺陷的产生引起弹性场的改变, 从而产生与热失配和晶格失配影响材料物理性能相类似的效果, 而且它们会带来新的后果. 如体缺陷的存在会对载流子输运性质产生显著影响, 而且在缺陷表面还会产生表面态, 从而影响光学与电学性能.

半导体掺杂技术是半导体工艺的重要组成部分. 无论是施主掺杂还是受主掺杂都是将原晶体结构中的部分原子用掺杂原子替代. 由于掺杂原子与原晶体内的原子的体积、核外波函数等不同, 因此将在材料体内产生新的应力.

综上所述, 半导体微结构中产生应力的因素是多种多样的, 有时是几种因素共同作用的结果. 这里需要指出的是: 晶体内部或微结构内部应力对其物理性能的影响并不总是负面的. 事实上, 研究人员已经提出“应变能带工程”, 通过适当调节晶体内部或微结构内的组份及应变, 来设计所希冀的能带结构.

5.3 半导体微结构力学研究进展

国内外对量子点结构的力学问题以及力学量 (应力、应变或弹性能) 对其电学、光学性能的影响的研究已经取得了一些进展, 所采用的主要方法有: 解析或半解析法^[82~97], 有限元法^[98,99~112], 分子模拟^[113~120] 等, 下面分别就这些方法进行简要评述.

5.3.1 解析法或半解析法

研究量子点微结构由于晶格失配和热失配所导致的应变场, 通常引入如下一些假设:

(1) 线弹性假设. 即将量子点内的材料、基体材料看作为线弹性材料.

(2) 理想情形近似. 生长形成的量子点形状有时可以近似为球形或椭球形, 此时量子点的材料可设定为各向异性材料, 且基体材料近似为各向同性材料. 由复合材料力学理论可知, 这种情形可用 Eshelby 等效夹杂理论进行求解. 尽管这是一个极强的近似, 甚至与实际自组装生长的量子点形状截然不同, 但有解析的结果, 并可定量地反映简化模型的弹性场, 从而为进一步研究力学场与其它物理性能的关系提供基础.

(3) 各向同性假设与等模量假设. 当量子点形状为一般情形时, 假定量子点内材料与基体材料的弹性模量相同, 且为各向同性材料. 这样做的直接结果就是将原问题转化为 Eshelby 夹杂问题 (inclusion problem). 目前, 文献报道得比较多的量子点结构通常由

立方晶系材料组成,如 Ge/Si, InAs/GaAs 等. 一般来说,立方晶系材料较其它类型的各向异性材料更接近于各向同性. 此外,在量子点结构内原子间一般通过共价键结合,量子点内外价键类型相似,在各向同性假设之后,量子点内外材料的弹性常数往往也相差不大,如 Ge/Si 量子点结构在各向同性假设之后,Ge 与 Si 的杨氏模量之比约为 1:1.2,若为合金量子点结构,两者则更加接近. 在解析法或半解析法的研究报道中,各向同性假设与等模量假设经常被采用,只有极少量的报道是仅采用等模量假设,即假设量子点内外的弹性常数相同,但仍保持为各向异性材料(这在后面的综述中谈及). 尽管这里定性的说明了各向同性假设与等模量假设的合理性,但不可否认的是这一假定存在一定程度的近似,对于不同材料组成的系统,所引起的误差将是不同的.

(4) 初始失配应变假设. 无论是热失配还是晶格失配,由它们所产生的初始失配应变通常情况下都假设为一个球张量. 这个假设对于一些材料是成立的,如:立方晶格半导体材料;但对六方晶格材料,如 GaN/Sapphire 微结构中就不成立,原因是在该系统中,线膨胀系数在 [0001] 方向上和 [0001] 面内是不等的.

(5) 无限大体假设. 由于量子点的尺度只有纳米量级,因此将微米尺度的结构假设为无限大体,所产生的误差并不会太大. 因此,一般来说此假设是合理的,但是在分析表面生长层应力应变时,这样的假设将不再适用,此时可作半无限大体假设. 另外,对于研究表面三维岛或纳米线时,半无限大体的假设也是不可行的. 因此根据具体研究问题的性质的不同,对以上各假设需要作出适当的取舍.

Gosling 和 Willis^[82] 基于 Eshelby 本征夹杂的思想,研究了无限大体内周期性排列的梯形量子线的力学问题,得到了应变场的解析的结果. 但在所选用的体系中,假定夹杂与基体有相同的弹性常数并作了各向同性假设.

Downes 和 Faux 等^[83~86] 计算了无限大体内一球量子点结构的弹性场,发现量子点外的应力场正比于量子点的体积,因此运用叠加原理可以求出任意形状量子点结构的弹性场. 运用此思想,计算了矩形量子线和立方量子点结构的弹性场,给出了解析的表达式. 但在他们的推导与计算中存在一些问题,如:忽视了球形量子点内应力与量子点外应力表达形式的不同,从而使自己的推导过程出现奇异性,而这种奇异性却又在进一步推导过程中被忽视,因此最终导致了不正确的结果. 另外,在他们的推导过程中存在着一定的数学上的错误. 尽管出现了以上一些问题,但 Downes 等提出的这一方法的物理图像清晰,因此

被许多文献所引用.

金字塔型量子点是一种比较典型的应变自组装生长的结构. 在均匀初始应变条件下, Pearson 和 Faux^[87] 给出了该结构的应变解析表达式,并讨论了结构的形状对其弹性场的影响. 此外,他们还利用等模量假设和正交各向异性弹性体的格林函数近似计算了长方体形状的量子点结构的弹性场,但其过程需要太多的经验参数.

Davies^[88] 通过对球形量子点结构位移表达式与静电学泊松方程的比较,得到对应的关系,从而借助于静电学的有关方法得到了任意形状的量子点结构的位移表达形式. 并以此为基础,研究了立方晶格晶体的压电效应,文中还对各向同性假设所导致的误差进行了定性的一般性讨论.

Davies^[89] 还研究了半无限大体内量子点结构所引起的弹性场,其研究结果表明半无限大体内的应力应变可以用无限大体内的应力应变表示出来,这样只要计算无限大体内的弹性场就可以得到相应半无限大体内问题的弹性解.

Davies 和 Larkin 等^[90,91] 研究了超晶格结构表面电极由于热失配所产生的弹性场及由此产生的压电效应,并讨论了弹性场对超晶格电子性能的影响. 在计算矩形电极的弹性场过程中针对电极提出了 3 种不同的模型,即刚性模型 (rigid gate)、弹性模型 (elastic gate)、正弦模型 (sine gate),并讨论了 3 种不同模型对其系统能量的影响.

Chiu 和 Poh^[92] 提出通过边界微扰法来估算形成量子点的应变能,作者的分析表明与其它方法相比较,其计算量很小,该方法只需要二维积分,而其它方法需要四维积分.

Faux 和 Pearson^[93] 基于第一原理 (the first-principle) 以及 Lifshits 和 Rosentsverg 提出的无限大体各向异性材料的 Green 函数的级数表达,研究了各向异性量子点结构的应变场,结果表明量子点外的静水应变不为零,这与不计及各向异性条件下的结论明显不同. 他们的研究是建立在等模量假设基础之上的.

Chu 和 Wang^[94] 在各向同性和等模量假设的基础上,研究了无限大基体内含一均质量量子点因晶格失配或热失配所引起的弹性场,通过分析单位体积球形量子点结构的弹性场,推导得到了量子点结构中任意一点 x 应力场的一般表达式,即

$$\sigma(x) = -\frac{E\varepsilon_0 H(x)}{1-\nu} \mathbf{I} - \frac{E\varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \times \int_{\partial V} \frac{x_i - x'_i}{r^3} \mathbf{e}_i \otimes d\mathbf{S}(x') \quad (8)$$

式中 E 、 ν 和 ε_0 分别为材料的杨氏模量、泊松比和

均质量量子点结构中的初始失配应变, \mathbf{I} 为 2 阶单位张量, \mathbf{e}_i 为张量的基向量, \mathbf{S} 为面积分微元. $H(\mathbf{x})$ 为 Heaviside 函数, 即

$$H(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in V \\ 0, & \mathbf{x} \notin V \end{cases}$$

式中 V 为量子点所占有的区域, 式 (8) 中的应力表达式有两个部分组成, 第 1 部分为一各向同性项, 且仅与点 \mathbf{x} 是否在量子点内有关. 第 2 项为一面积分, 被积函数的形式非常简单, 这就使得对任意形状的量子点结构的应力场计算变得较为简单. 利用该表达式很容易证明量子点结构中任一点的应力满足

$$\sigma_{ii} = -\frac{2E\varepsilon_0}{1-\nu}H(\mathbf{x}) \quad (9)$$

它表明量子点结构任意一点应力张量的球量部分与其所在位置密切相关, 在量子点内其值为常量, 而在量子点外, 其值为零. 另外, 由于进行了各向同性和等模量假设, 因此对于多个量子点结构, 可根据叠加原理求解, 即

$$\sigma(\mathbf{x}) = -\frac{E\varepsilon_0 H(\mathbf{x})}{1-\nu} \mathbf{I} - \frac{E\varepsilon_0}{4\pi(1-\nu)} \times \sum \int_{\partial V_i} \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}'_i}{r^3} \mathbf{e}_i \otimes d\mathbf{S}(\mathbf{x}') \quad (10)$$

式中 V_i 为第 i 个量子点结构所占有的区域. 基于式 (8), Chu 和 Wang^[94] 给出了长方体形量子点结构应力场的解析表达式, 发现随着量子点高度的增加, 量子点内正应变逐渐减小, 即由晶格失配或热失配引起的弹性场得到了较大的松弛. 此外, 还应用式 (8), 数值分析了半球形量子点结构的应变场.

考虑到实际量子点结构制作过程中量子点材料与基体材料间的扩散、渗透等因素将导致量子点内组份具有非均匀的特性, Chu 和 Wang^[95] 分析了量子点结构中组份的非均匀性对量子点结构的弹性场的影响, 在各向同性和等模量假设基础上, 推导得到了组份为非均匀分布时应力的一般表达式, 即

$$\sigma(\mathbf{x}) = -\frac{E\varepsilon_0(\mathbf{x})H(\mathbf{x})}{1-\nu} \mathbf{I} - \int_{\partial V} \left[\frac{E\varepsilon_0(\mathbf{x}')}{4\pi(1-\nu)} \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}'_i}{r^3} \mathbf{e}_i \right] \otimes d\mathbf{S}(\mathbf{x}') + \int_V \frac{E}{4\pi(1-\nu)} \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}'_i}{r^3} \mathbf{e}_i \otimes [\nabla'_x \varepsilon_0(\mathbf{x}')] dV(\mathbf{x}') \quad (11)$$

式中 $\varepsilon_0(\mathbf{x})$ 为非均质量量子点结构的初始失配应变. 上

式在量子点组份为线性分布的条件下可退化为

$$\sigma(\mathbf{x}) = -\frac{E\varepsilon_0(\mathbf{x})H(\mathbf{x})}{1-\nu} \mathbf{I} - \int_{\partial V} \left[\frac{E\varepsilon_0(\mathbf{x}')}{4\pi(1-\nu)} \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}'_i}{r^3} \mathbf{e}_i \right] \otimes d\mathbf{S}(\mathbf{x}') + \int_{\partial V} \frac{E}{4\pi(1-\nu)} \frac{d\mathbf{S}(\mathbf{x}')}{r} \otimes \mathbf{K}\varepsilon_0 dV(\mathbf{x}') \quad (12)$$

式中 \mathbf{K} 为量子点中组份线性分布系数. 基于上式, Chu 和 Wang^[95] 分析了界面区域沿生长方向组份为线性分布时长方体形量子点结构中弹性场, 并给出了解析的结果. 从数值分析的结果发现, 界面区域组份的非均匀分布对量子点结构的弹性场的影响相当大. 一般地, 忽略界面区域组份的非均匀分布将过低地估计量子点中部区域的弹性场. 此外, Wang 和 Chu^[96] 采用微扰理论分析了量子点结构的弹性场. 该理论计及了材料的各向异性以及量子点与基体材料的异质特性对弹性场的影响.

综合以上关于解析法的研究报道, 能够得到解析结果的微结构仅限于圆柱形、周期排列梯形量子线结构和球形、长方体形、金字塔型量子点结构. 对于其它类型的量子点结构, 如比较典型的棱镜型量子点结构, 需要进一步的深入研究. 正如在第 4.5 节中所述, 实际量子点结构的组份分布具有非均匀性, 并且是量子点结构研究的热点问题之一. 对量子点结构的力学研究来说, 组份的非均匀特性将直接导致初始失配应变的非均匀性, 从而导致结构中弹性场与组份均匀分布的情形不同, 是一个新的力学问题. 目前, 在组份非均匀条件下采用解析法或半解析法进行研究的报道相对较少. 据笔者所知, 仅限于 Chu 和 Wang^[95] 关于非均匀长方体形量子点结构和 Duan 等^[97] 关于球形量子点结构的研究报道. 因此基于实际量子点结构组份分布的非均匀性, 开展对典型结构, 如金字塔型、棱镜型等量子点结构弹性场的研究是一个重要的研究内容. 此外, 实际量子点结构具有各向异性和异质特性, 解析法往往忽略这些性质. 尽管 Pearson 和 Faux^[87], Wang 和 Chu^[96] 在此方面做了一些工作, 但仍有进一步研究的必要.

5.3.2 有限元法

有限元方法可以有效地用于各类结构的弹性分析. 具体运用到量子点结构中, 对于失配应变可以通过热失配来模拟加载.

Grundmann 等^[98] 结合有限元法, 研究了应变对量子点结构光学和电学性质的影响. 尽管有限元法可以将材料的各向异性考虑进来, 但他们忽视了量子点结构自身材料组份的非均匀性.

Freund 和 Johnson^[103,104] 在计及应变对势场影

响的基础上,运用有限元法计算了金字塔型量子点等纳米结构的量子力学问题,结果表明应变对电学性能有显著的影响,使得能带发生了显著的偏移,能隙也发生了显著的变化。

Thean 和 Lebturton^[105] 采用有效质量近似和连续介质模型,运用有限元的思想和密度泛函理论计算了 Si/SiO₂ 量子点结构的能带,表明了应变对量子点空间对称性的影响提高了对电子的限制作用,显著地改变了量子点结构的能带结构和量子点的单电子注入行为。

Johnson 等^[106] 研究了多量子点结构的能带结构,分析了载流子(电子、空穴、激子)的波函数,计算采用有限元方法,并采用计及应变的波动方程进行计算。所研究的体系为 InAlAs/AlGaAs 量子点结构,量子点数量达 30 个。计算表明,波函数主要分布在大的量子点周围,而在较小量子点内的分布则较少。

Zhang 和 Bower^[107] 基于量子点生长过程中表面自由能的变化和对表面原子扩散的分析,采用三维有限元法模拟预测了量子点结构的形成。在他们的模拟中预设了双正弦(double sinusoid)粗糙表面(或扰动表面),并采用周期性边界条件和各向同性假设,模拟得到了规则分布的量子点结构。

Liu 等^[108,109] 从理论上研究了多层量子点间的耦合问题,发现存在一个可以生长高质量量子点结构的“窗口”,即通过调整系统的参数,可以制作高密度、尺寸均一且规则排列的多层量子点结构。在他们的研究中还发现新生长层量子点的位置发生在外延层应变能密度最大值的位置。

此外,国内的一些研究组采用有限元法研究了量子点结构的力学问题^[110~112]。如杨洪波等^[110] 运用有限元方法计算了几种几何形状不同的组份均一的量子点结构的弹性应变能,得到了金字塔型结构较为稳定的结论。

目前在采用有限元法分析量子点的结构的力学问题时,通常假定量子点材料是均一的,而实际量子点结构组份的这种不均匀性往往十分明显。如在 Malachias 等^[99] 制备的 GeSi/Si 合金量子点中,量子点的 Ge 组份沿 [001] 方向从底部的纯 Ge 几乎线性地减少,至量子点顶部组份为纯 Si。量子点内组份不均匀性可以起到减小量子点结构中界面附近的弹性场的作用,因此无论是直接计算量子点结构的弹性场,还是分析多层量子点间的耦合效应,都应予以考虑。

5.3.3 分子模拟

在研究量子点结构的弹性场和物理性能时,也可以采用分子模拟的手段来进行。分子模拟通常主要包

括两种方法^[113,114],一种是分子动力学,另一种是所谓的蒙特卡罗法。更复杂的一种方法是从第一原理出发,计算原子与原子之间的相互作用势,再用分子动力学或蒙特卡罗法来计算^[115]。由于计算机计算能力的不断提高,个人电脑已经发展到可以承担对上万个原子进行分子模拟的任务。即使如此,使用分子模拟在研究量子点结构时也需要十分慎重,因为在考虑分子相互作用时,需要一些经验参数,不同的参数可能对结果有较大影响,另外使用分子模拟,从微观角度来看,计算的具体结果是不可重复的(即在相同初始条件下,特定原子在两次计算结果中的最终位置是不同的),这似乎与我们传统的无论实验还是理论计算所要求的可重复性存在矛盾。事实上,微观系统是相对复杂的,但其宏观表象可能相对简单,如对温度的理解,它是大量微观粒子运动的宏观表象,而在微观状态中,粒子的运动可能是杂乱的。此外,分子动力学计算的时间步是极其微小的,一般在飞秒量级(10⁻¹⁵ s),总的计算时间大概在皮秒量级(10⁻¹² s)到纳秒量级(10⁻⁹ s)之间。在这样短的时间内,系统是否达到平衡状态是个疑问。因此有人认为,人们对分子动力学模拟的认同,更象是基于一种信仰。尽管存在这样的问题,但此方法仍然被认为是分析微观系统问题的一种有效方法。

Makeev 等^[116] 运用原子模拟的思想对截断金字塔型量子点 Ge/Si 体系进行了研究,分析了超过两百万个原子所组成的体系的力学性能。模拟中采用周期性边界条件,所采用的原子间相互作用势较为简单,最终得到了由晶格失配引起的位移场。

Migliorato^[48,49,120] 运用分子模拟计算了 InGaAs/GaAs 量子点结构中组份对压电效应以及导带的影响,表明了压电场对实验观测到的光学各向异性有显著影响。

目前,能采用分子模拟技术精确模拟的系统还是比较有限的,这主要是因为不同原子之间的相互作用势的确定比较困难,尤其是表面或界面的处理需要进一步研究。实际操作时,为了减少运算时间,往往采用相当简化的相互作用势,如 L-J 势等。由于模拟中常采用周期性边界条件,因此所得的结果也是针对周期性排布的量子点阵列,这与实际结构中量子点分布的非均匀以及尺度的不均一有一定的区别。分子模拟的主要优点在于可以展示形貌演化的微观过程,日前在这方面的研究却相对较少。

此外,在研究量子点形成过程中的形貌演化方面,研究人员提出了多种解释。通常主要是通过体系能量的变化,即量子点生长形成前后应变能、表面能的变化等来进行研究。

Tersoff 和 Tromp^[121] 基于对弹性能与表面能的

能量分析, 得出: 在一定临界尺度以内, 量子结构具有紧凑而对称的结构, 而超过这一临界尺度, 量子点结构的形状将发生转变, 即量子点更倾向于形成“准量子线结构”, 从而解释了在 Si [001] 面上生长 Ag 所形成的准量子线结构。

Shchukin 等^[122] 计算了在生长晶面的不同晶向上不同排列的量子点的总能量, 基于体系趋于能量最小的原理, 指出在一定条件下可以形成稳定的周期性结构; 对于立方晶格的半导体外延生长, 量子点的二维周期性排列趋向沿最低的硬度 [100] 和 [010] 方向。

Ni 等^[123] 基于对微结构体系能量的分析, 首先考察了单个圆形岛 (single circular island) 的稳定性问题, 然后对六角形分布的圆形岛阵列 (hexagonal array of circular islands) 的形貌演化进行动力学模拟 (dynamic simulation)。数值计算表明, 单个圆形岛的形状的转变取决于其自身的尺度; 而岛阵列中各岛的形貌的演化受岛与岛之间长程相互作用的影响显著, 其稳定性依赖于岛阵列的初始特征尺度, 即岛的初始尺寸和岛间距离。Ni 等^[124] 还分析了多层量子点生长过程中的已生长层量子点对当前生长层量子点生长模式的影响, 发现已生长层量子点中失配应变在外延层表面形成的弹性场和非均匀表面应力之间存在竞争关系, 并决定了生长层量子点的排布规则。此外, Ni 和 He^[125] 还从能量角度研究了因失配所导致的二维岛的分岔问题。

综合以上关于量子点结构的力学研究报道及评述, 因初始失配应变在量子点结构中引起的弹性场的研究已经取得了一些进展, 进一步的研究应注重实际量子点结构的结构类型以及实际量子点结构中材料组份的非均匀性。从力学角度研究和模拟量子点结构的形成机制及其形貌的演化规律也已取得了一些定性的结果。模拟结果的准确性一般受制于两个方面, 一是基底 (substrate)、量子点的材料参数的选择以及量子点结构型式是否与实际结构接近或相同; 二是表面能的计算和扩散方程是否与实际情况相符。现有的一些研究在上述两个方面往往都做了比较大的假设或存在一些欠缺, 因此需要进一步的深入研究。此外, 在力学性能与物理性能的耦合研究方面, 目前报道主要集中于量子点结构的压电效应, 因此很有必要进一步开展力学量与物理性能耦合的定性及至定量的研究。

5.3.4 关于连续介质力学方法适用性的讨论

前述的无论是解析法、半解析法, 还是有限元法都是基于连续介质力学理论。在微纳米结构的研究中, 连续介质力学及其方法的适用性经常引起人们

的讨论。证明或说明一种理论的适用性最有效的办法就是通过实验来验证, 但由于在微纳米结构中测试条件的苛刻以及多种复杂因素的影响, 使得实验的结果往往较为分散, 重复性较差。尽管如此, 还是有一些定性的结果得已报道。如, Stangl 等^[126] 采用连续介质力学的方法研究了半无限大体内含一量子点的弹性场, 发现表面静水应力 (hydrostatic stress) 与量子点到表面的距离近似成反比。该结论为 Schmidt 等^[127] 的实验结果所证实, 实验时采用 PL 谱分析能量的变化 (the energy shift of the photoluminescence lines)。

另外一个方法, 就是通过将采用连续介质力学方法所得到的结果与分子模拟的结果进行比较来甄别。在使用这一方法时, 通常隐含了一个前提条件, 即认为分子模拟的结果是可靠的, 从而可将其作为判据。然而这一前提是否成立并没有人给出明确的证明 (事实上, 影响分子模拟结果的因素是多重的, 尤其是在原子间相互作用势的精确描述上, 在微纳米尺度内, 原子在晶粒内、在表 / 界面及其附近相互作用势一般来说是不同的, 但在相当多的分子模拟中, 这一点常被忽略或极大的简化)。Pryor 等^[128] 采用上述两种方法研究了金字塔型 InAs/GaAs 量子点结构的弹性场, 发现连续介质力学的结果与分子模拟的结果仅在量子点界面处相差较大, 而在量子点中部及量子点外符合得相当好 (Stangl 等^[126] 称之为 “a good correspondence of two methods”), 所产生的相对误差约为 4%^[126]。Daruka 等^[129] 采用 Stillinger-Weber 经验势研究了 Ge/Si 量子点结构的应变分布, 并与连续介质力学方法所得的结果进行了比较, 发现两者符合得很好。而他们的结论被 Makeev 和 Madhukar^[130] 的分析进一步证实。

尽管连续介质力学及其方法在微纳米结构的研究中的适用性并非无可争议, 但从大量的文献报道及已有的一些对比来看, 连续介质力学及其方法在诸如表面物理、薄膜物理、MEMS 以及半导体微结构等领域起着极为重要的作用, 仍是主要的研究手段之一。

6 总结及展望

以上主要从 4 个方面简要介绍了量子点结构的研究背景及目前研究的一些进展情况, 基本说明了半导体量子点结构的特点及其研究的一些方法, 以及开展此方面研究的重要理论意义和实用价值。

力学在自然科学发展史中, 尤其是在物理学的发展中起到了举足轻重的作用。进入 21 世纪, 科学技术的发展要求多学科的交叉与融合, 在纳米科技领域

这种需求则更加迫切, 力学必将在这一领域扮演极为重要的角色. 半导体量子点结构制备及性能受到多方面的影响, 它是物理、化学、材料、力学等众多学科交叉的研究领域. 笔者认为进一步开展量子点结构的力学研究需要特别注意以下几个方面:

(1) 进一步开展量子点结构的多场耦合的研究.

优异的光学与电学等物理性能是量子点结构引起人们关注的主要原因, 因此开展量子点结构中弹性场与半导体量子点结构的光学、电学等性能的耦合与关联的研究有着十分重要的理论意义和实用价值.

(2) 开展以量子点结构为背景的多尺度计算. 量子点结构的尺度为纳米量级, 在该尺度内有必要进一步分析传统方法的适用性, 这涉及到一个多尺度计算的问题. 半导体量子点结构测试方法、表征手段的多样性可以为验证多尺度计算的结果以及传统连续介质力学等方法提供很好的平台.

(3) 进一步研究表面及界面在量子点制作过程中的作用, 以及表面及界面对量子点结构的物理性能的影响. 尽管在此方面已经有了一些结果, 但还相当的不充分.

致 谢 审稿人提出的修改意见与建议使本文在结构上更加紧凑, 在内容上得以丰富, 在内涵上得以提高, 笔者对此表示衷心感谢.

参 考 文 献

- 杜磊, 庄奕琪. 纳米电子学. 北京: 电子工业出版社, 2004. 1~35
- 邓志杰, 郑安生. 半导体材料. 北京: 化学工业出版社, 2004. 350~352
- 赵凤璁, 张春玲, 王占国. 半导体量子点及其应用 I. 物理, 2004, 33(4): 249~256
- 赵凤璁, 张春玲, 王占国. 半导体量子点及其应用 II. 物理, 2004, 33(5): 327~334
- 黄昌俊, 余金中, 王启明. 自组装 GeSi 量子点的研究进展. 自然科学进展, 2004, 14(1): 28~33
- 彭英才. 半导体超晶格与量子微结构研究 30 年. 科技进展, 1998, 20(5): 263~267
- 时文华, 李传波, 王启明. Ge/Si 量子点的生长研究进展. 半导体光电, 2004, 25(4): 247~252
- 吴晓春, 陈文驹. 半导体量子点结构理论研究进展. 物理, 1995, 24(4): 218~223
- 程宪章, 张忱. 低维半导体材料研究进展. 半导体杂志, 2000, 25(3): 44~55
- 谭翠燕, 梁汝强, 阮康成. 量子点在生命科学中的应用. 生物化学与生物物理学报, 2002, 34(1): 1~5
- Klimov V I, Buriak J M, Wayner D D M, et al. Quantum Confined Semiconductor Nanostructures. Warrendale, Pennsylvania: Materials Research Society, 2003
- Michler P. Single Quantum Dots Fundamentals: Application and New Concepts. Berlin: Springer, 2003
- Bandyopadhyay S, Nalwa H S. Quantum Dots and Nanowires. USA: American Scientific Publishers, 2003
- Alferov Z. Nobel lecture: the double heterostructure concept and its applications in physics, electronics and technology. *Reviews of Modern Physics*, 2001, 73(3): 767~782
- Pankove J I, Moustakas T D. Gallium Nitride (GaN) II, Semiconductors and Semimetals. San Diego: Academic Press, 1999. 57
- 杨卫, 马新玲, 王宏涛等. 纳米力学进展. 力学进展, 2002, 32(2): 161~174
- 杨卫, 王宏涛, 马新玲等. 纳米力学进展 (续). 力学进展, 2003, 33(2): 175~196
- 阎守胜. 固体物理基础. 北京: 北京大学出版社, 2003
- 叶良修. 半导体物理学. 北京: 高等教育出版社, 1983
- 罗晋生, 范永平, 朱秉升. 半导体理论. 四川: 电子科技大学出版社, 1991
- 黄昆 (原著), 韩汝琦 (改编). 固体物理学. 北京: 高等教育出版社, 2004
- Kittel C. Introduction to Solid State Physics, 7th ed. New York: John Wiley & Sons, 1996
- Seeger K. Semiconductor Physics: An Introduction, 8th ed. Berlin: Springer-Verlag, 2002
- 张永伟, 王自强. 分子动力学方法在研究材料力学行为中的应用进展. 力学进展, 1996, 26(1): 14~27
- 李国华. 半导体量子器件物理讲座第五讲弹道输运器件和量子干涉器件. 物理, 2001, 30(8): 506~510
- 陈早生, 孙连亮, 李树深. 磁场调制下的双电子量子点 qubit. 半导体学报, 2004, 25(7): 790~793
- 李树深, 吴晓光, 郑厚植. 固态量子计算的若干重要物理问题研究. 物理, 2004, 33(6): 404~407
- 潘留仙, 刘金龙, 李树深等. InAs/GaAs 单电子量子点量子比特的失相率. 中国科学 (A 辑), 2002, 32(6): 556~559
- 张胜坤, 蒋最敏, 王迅. 自组织生长错量子点的库仑荷电效应. 物理, 98(11): 643~645
- 郭荣辉, 赵正平, 郝跃等. 多岛单电子晶体管的实现及其源漏特性分析. 物理学报, 2005, 54(4): 1804~1808
- 徐海娥, 闫翠娥. 水溶性量子点的制备及应用. 化学进展, 2005, 17(5): 800~808
- Kash K, Scherer A, Worlock J M, et al. Optical spectroscopy of ultrasmall structures etched from quantum wells. *Applied Physics Letters*, 1986, 49(16): 1043~1045
- Cibert J, Petroff P M, Dolan G J, et al. Optically detected carrier confinement to one and zero dimension in GaAs quantum well wires and boxes. *Applied Physics Letters*, 1986, 49(19): 1275~1277
- Eaglesham D J, Cerullo M. Dislocation-free Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(100). *Physical Review Letters*, 1990, 64(16): 1943~1946
- Heidemeyer H, Denker U, Müller C, et al. Morphology response to strain field interferences in stacks of highly ordered quantum dot arrays. *Physical Review Letters*, 2003, 91, 196103
- Holý V, Springholz G, Pinczolits M, et al. Strain induced vertical and lateral correlations in quantum dot superlattices. *Physical Review Letters*, 1999, 83(2): 356~359
- He J, Nötzel R, Offermans P, et al. Formation of columnar (In,Ga)As quantum dots on GaAs(100). *Applied Physics Letters*, 2004, 85(14): 2771~2773
- Birudavolu S, Nuntawong N, Balakrishnan G, et al. Selective area growth of InAs quantum dots formed on a patterned GaAs substrate. *Applied Physics Letters*, 2004, 85(12): 2337~2339
- Li Donglin, Zhou Haoshen, Honma Itaru. Design and synthesis of self-ordered mesoporous nanocomposite through controlled in-situ crystallization, *Nature Materials*, 2004, 3(1): 65~72
- Chan Y, Zimmer J P, Stroh M, et al. Incorporation of luminescent nanocrystals into monodisperse core-shell sil-

- ica microspheres. *Advanced Materials*, 2004, 16(22-23): 2092~2097
- 41 Kim H, Achermann M, Laurant P B, et al. Synthesis and characterization of Co/CdSe core/shell nanocomposites: bifunctional magnetic-optical nanocrystals. *Journal of the American Chemical Society*, 2005, 127(2): 544~546
- 42 Hu M, Wang H Y, Xia M F, Ke F J, B Y L. Nonlocality effect in atomic force microscopy measurement and its reduction by an approaching method. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2005, 127(10): 445~450
- 43 Liu N, Bai Y L, Xia M F, Ke F J. Combined effect of surface tension, gravity and van der Waals force induced by a non-contact probe tip on the shape of liquid surface. *Chinese Physics Letters*, 2005, 22(8): 2012~2015
- 44 Liao X Z, Zou J, Cockayne D J H, et al. Indium segregation and enrichment in coherent $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum dots. *Physical Review Letters*, 1999, 82(25): 5148~5151
- 45 Steinshnider J, Harper J, Weimer M, et al. Origin of antimony segregation in $\text{GaInSb}/\text{InAs}$ strained-layer superlattices. *Physical Review Letters*, 2000, 85(21): 4562~4565
- 46 Rao M, Kim D, Mahajan S. Compositional dependence of phase separation in InGaN layers. *Applied Physics Letters*, 2004, 85(11): 1961~1963
- 47 Werner P, Scheerschmidt K, Zakharov N D, et al. Quantum dot structures in the InGaAs system investigated by TEM techniques. *Crystal Research and Technology*, 2000, 35(6): 759~768
- 48 Migliorato M A, Cullis A G, Fearn M, et al. Atomistic simulation of strain relaxation in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum dots with nonuniform composition. *Physical Review B*, 2002, 65(11), 115316
- 49 Migliorato M A, Cullis A G, Fearn M, et al. Atomistic simulation of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum dots with nonuniform composition. *Physica E*, 2002, 13(2-4): 1147~1150
- 50 Uberuaga B P, Leskovaar M, Smith P, et al. Diffusion of Ge below the $\text{Si}(100)$ surface: theory and experiment. *Physical Review Letters*, 2000, 84(11): 2441~2444
- 51 Ikeda A, Sumitomo K, Nishioka T, et al. Intermixing at $\text{Ge}/\text{Si}(001)$ interfaces studied by surface energy loss of medium energy ion scattering. *Surface Science*, 1997, 385(1): 200~206
- 52 Gunnella R, Castrucci P, Pinto N, et al. X-ray photoelectron-diffraction study of intermixing and morphology at the $\text{Ge}/\text{Si}(001)$ and $\text{Ge}/\text{Sb}/\text{Si}(001)$ interface. *Physical Review B*, 1996, 54(12): 8882~8891
- 53 Patthey L, Bullock E L, Abukawa T, et al. Mixed Ge-Si dimer growth at the $\text{Ge}/\text{Si}(001)-(2\times 1)$ surface. *Physical Review Letters*, 1995, 75(13): 2538~2541
- 54 Yeom H W, Sasaki M, Suzuki S, et al. Existence of a stable intermixing phase for monolayer Ge on $\text{Si}(001)$. *Surface Science*, 1997, 381(1): L533~L539
- 55 Steinshnider J, Weimer M, Kaspi R, et al. Visualizing interfacial structure at non-common-atom heterojunctions with cross-sectional scanning tunneling microscopy. *Physical Review Letters*, 2000, 85(14): 2953~2956
- 56 Dorin C, Mullunchick J M, Wauchope C. Intermixing and lateral composition modulation in GaAs/GaSb short period superlattices. *Journal of Applied Physics*, 2003, 94(3): 1667~1675
- 57 Pearson C, Dorin C, Millunchick J M, et al. Imaging the evolution of lateral composition modulation in strained alloy superlattices. *Physical Review Letters*, 2004, 92(5), 056101
- 58 Yang M J, Yang C H, Bennett B R, et al. Evidence of a hybridization gap in "semimetallic" InAs/GaSb systems. *Physical Review Letters*, 1997, 78(24): 4613~4616
- 59 Magri R, Zunger A. Effects of interfacial atomic segregation on optical properties of InAs/GaSb superlattices. *Physical Review B*, 2001, 64(8), 081305
- 60 Magri R, Zunger A. Effects of interfacial atomic segregation and intermixing on the electronic properties of InAs/GaSb superlattices. *Physical Review B*, 2002, 65(16), 165302
- 61 Maxson J B, Savage D E, Liu F, et al. Thermal roughening of a thin film: a new type of roughening transition. *Physical Review Letters*, 2000, 85(10): 2152~2155
- 62 Koiller B, Capaz R B, Chacham H. Segregation, interface morphology, and the optical properties of GaAs/AlAs quantum wells: a theoretical study. *Physical Review B*, 1999, 60(3): 1787~1791
- 63 Kern R, Muller P. Elastic relaxation of coherent epitaxial deposits. *Surface Science*, 1997, 392(1): 103~133
- 64 Walther T, Cullis A G, Norris D J, et al. Nature of the Stranski-Krastanow transition during epitaxy of InGaAs on GaAs . *Physical Review Letters*, 2001, 86(11): 2381~2384
- 65 Kret S, Benabbas T, Delamarre C, et al. High resolution electron microscope analysis of lattice distortions and In segregation in highly strained $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ coherent islands grown on $\text{GaAs}(001)$. *Journal of Applied Physics*, 1999, 86(4): 1988~1993
- 66 Liu N, Tersoff J, Baklenov O, et al. Nonuniform composition profile in $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ alloy quantum dots. *Physical Review Letters*, 2000, 84(2): 334~337
- 67 Magri R, Zunger A. Segregation effects on the optical properties of $(\text{InAs})/(\text{GaSb})$ superlattices. *Physica E*, 2002, 13(2-4): 325~328
- 68 Steinshnider J, Weimer M, Kaspi R, et al. Visualizing interfacial structure at non-common-atom heterojunctions with cross-sectional scanning tunneling microscopy. *Physical Review Letters*, 2000, 85(2): 2953~2956
- 69 Mayrock O, Wünsche H J, Henneberger F. Polarization charge screening and indium surface segregation in $(\text{In,Ga})\text{N}/\text{GaN}$ single and multiple quantum wells. *Physical Review B*, 2000, 62(24): 16870~16880
- 70 Matsuda K, Saiki T, Yamada T, et al. Direct optical observation of compositional fluctuation in $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ by near-field photoluminescence spectroscopy and microscopy with high spatial resolution. *Applied Physics Letters*, 2004, 85(15): 3077~3079
- 71 Hanke M, Grigoriev D, Schmidbauer M, et al. Vertical composition gradient in $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ alloy quantum dots as revealed by high-resolution x-ray diffraction. *Applied Physics Letters*, 2004, 85(15): 3062~3064
- 72 Lemaître A, Patriarche G, Glas F. Composition profiling of InAs/GaAs quantum dots. *Applied Physics Letters*, 2004, 85(17): 3717~3719
- 73 Chaldyshev V V, Kolesnikova A L, Bert N A, et al. Investigation of dislocation loops associated with As-Sb nanoclusters in GaAs . *Journal of Applied Physics*, 2005, 97, 024309
- 74 Lenz A, Eisele H, Timm R, et al. Nanovoids in $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ quantum dots observed by cross-sectional scanning tunneling microscopy. *Applied Physics Letters*, 2004, 85(17): 3848~3850
- 75 Kim Y G, Joh Y S, Song J H, et al. Strain-sensitive size modulations in ZnSe/ZnS quantum dots grown on GaAs substrates. *Applied Physics Letters*, 2004, 85(11): 2056~2058
- 76 Shan W, Walukiewicz W, Ager III J W, et al. Pressure-dependent photoluminescence study of ZnO nanowires. *Ap-*

- plied *Physics Letters*, 2005, 86, 153117
- 77 张福学, 王丽坤. 现代压电学. 北京: 科学出版社, 2001
- 78 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*, 1957, 241: 376~396
- 79 Eshelby J D. The elastic field outside an ellipsoidal inclusion. *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, 1959, 252: 561~569
- 80 Eshelby J D. Elastic inclusion and inhomogeneities. In: Sneddon I N, Hill R, eds. *Progress in solid mechanics 2nd ed.* Amsterdam: North-Holland, 1961. 222~246
- 81 Mura T. *Micromechanics of Defects in Solids*. Dordrecht: Martinus Nijhoff Publishers, 1987
- 82 Gosling T J, Willis J R. Mechanical stability and electronic properties of buried strained quantum wire arrays. *Journal of Applied Physics*, 1995, 77(11): 5601~5610
- 83 Downes J R, Faux D A. Calculation of strain distributions in multiple-quantum-well strained-layer structures. *Journal of Applied Physics*, 1995, 77(6): 2444~2447
- 84 Downes J R, Faux D A, O'Reilly E P. A simple method for calculating strain distributions in quantum dot structures. *Journal of Applied Physics*, 1997, 81(10): 6700~6702
- 85 Faux D A, Downes J R, O'Reilly E P. A simple method for calculating strain distributions in quantum-wire structures. *Journal of Applied Physics*, 1996, 80(4): 2515~2517
- 86 Andreev A D, Downes J R, Faux D A, et al. Strain distributions in quantum dots of arbitrary shape. *Journal of Applied Physics*, 1999, 86(1): 297~305
- 87 Pearson G S, Faux D A. Analytical solutions for strain in pyramidal quantum dots. *Journal of Applied Physics*, 2000, 88(2): 730~736
- 88 Davies J H. Elastic and piezoelectric fields around a buried quantum dot: a simple picture. *Journal of Applied Physics*, 1998, 84(3): 1358~1365
- 89 Davies J H. Elastic field in a semi-infinite solid due to thermal expansion or a coherently misfitting inclusion. *Journal of Applied Mechanics*, 2003, 70(5): 655~660
- 90 Davies J H, Larkin I A. Theory of potential modulation in lateral surface superlattices. *Physical Review B*, 1994, 49(7): 4800~4809
- 91 Larkin I A, Davies J H, Andrew R L. Theory of potential modulation in lateral surface piezoelectric effect II: superlattices. *Physical Review B*, 1997, 56(23): 15242~15251
- 92 Chiu C H, Poh C T. Strain energy of nanoislands on strained film-substrate systems. *Physical Review B*, 2005, 71: 045406
- 93 Faux D A, Pearson G S. Green's tensors for anisotropic elasticity: application to quantum dots. *Physical Review B*, 2002, 62(8): R4798~R4801
- 94 Chu H J, Wang J. An approach for calculating strain distributions in arbitrarily shaped quantum dots. *Chinese Physics Letters*, 2005, 22: 667~670
- 95 Chu H J, Wang J. Strain distribution in arbitrarily shaped quantum dots with nonuniform composition. *Journal of Applied Physics*, 2005, 98, 034315
- 96 Wang J, Chu H J. A perturbation theory for calculating strain distributions in heterogeneous and anisotropic quantum dot structures. *Journal of Applied Physics*, 2006, 100, 053520
- 97 Duan H L, Karihaloo B L, Wang J, et al. Compatible composition profiles and critical sizes of alloyed quantum dots. *Physical Review B*, 2006, 74, 195328
- 98 Grundmann M, Stier O, and Bimberg D. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: strain distribution, optical phonons, and electronic structure. *Physical Review B*, 1995, 52(16): 11969~11981
- 99 Malachias A, Magalhães-Paniago R, Kycia S, et al. X-ray study of strain and composition of Si/Ge_{0.85}Si_{0.15} (111) islands grown in Volmer-Weber mode. *Journal of Applied Physics*, 2004, 96(6): 3234~3238
- 100 Faux D A, Howells S G, Bangert U, et al. Strain relaxation in strained buried heterostructure lasers. *Applied Physics Letters*, 1994, 64(10): 1271~1273
- 101 Nishi K, Yamaguchi A A, Ahopelto J, et al. Analyses of localized confinement potential in semiconductor strained wires and dots buried in lattice-mismatched materials. *Journal of Applied Physics*, 1994, 76(11): 7437~7445
- 102 Benabbas T, Androussi Y, Lefebvre A. A finite-element study of strain fields in vertically aligned InAs islands in GaAs. *Journal of Applied Physics*, 1999, 86(4): 1945~1950.
- 103 Freund L B, Johnson H T. Influence of strain on functional characteristics of nanoelectronic devices. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2001, 49(9): 1925~1935
- 104 Johnson H T, Freund L B. The influence of strain on confined electronic states in semiconductor quantum structures. *International Journal of Solids and Structures*, 2001, 38(6): 1045~1062
- 105 Thean A, Leburton J P. Geometry and strain effects on single-electron charging in silicon nano-crystals. *Journal of Applied Physics*, 2001, 90(12): 6384~6390
- 106 Johnson H T, Bose R, Robinson H D, et al. Simulation evidence for lateral excitation transfer in a self-assembled quantum-dot array. *Applied Physics Letters*, 2003, 82(20): 3382~3384
- 107 Zhang Y W, Bower A F. Numerical simulations of island formation in a coherent strained epitaxial thin film system. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1999, 47(11): 2273~2297
- 108 Liu P, Zhang Y W, Lu C. Three-dimensional finite-element simulations of the self-organized growth of quantum dot superlattices. *Physical Review B*, 2003, 68(19), 195314
- 109 Liu P, Zhang Y W, Lu C. Self-organized growth of three-dimensional quantum-dot superlattices. *Applied Physics Letters*, 2002, 80 (21): 3910~3912
- 110 杨红波, 俞重远. 半导体量子点弹性应变能的研究. *人工晶体学报*, 2004, 33(4): 531~534
- 111 刘玉敏, 俞重远, 杨红波等. 异质外延自组织锥形量子点长程相互作用对弹性应变场分布的影响. *高技术通讯*, 2006, 16(1): 1~4
- 112 刘玉敏, 俞重远, 杨红波等. 应变自组织量子点的几何形态对应应变场分布的影响. *半导体学报*, 2005, 26(12): 2355~2362
- 113 Frenkel D, Smit B. *Understanding Molecular Simulation*. New York: Academic Press, 2002
- 114 Cramer C J. *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*. Cornwall: John Wiley & Sons, 2004
- 115 Ohno K, Esfarjani K, Kawazoe Y. *Computational Materials Science: From Ab Initio to Monte Carlo Methods*. Germany: Springer, 1999
- 116 Makeev M A, Yu Wenbin, Madhukar A. Atomic scale stresses and strains in Ge/Si(001) nanopixels: an atomistic simulation study. *Journal of Applied Physics*, 2004, 96(8): 4429~4443
- 117 Cusack M A, Briddon P R, Jaros M. Electronic structure of InAs/GaAs self-assembled quantum dots. *Physical Review B*, 1996, 54(4): R2300-R2303
- 118 Kuchi Y K, Sugii H, Shintani K. Strain profiles in pyramidal quantum dots by means of atomistic simulation. *Journal of Applied Physics*, 2001, 89(2): 1191~1196

- 119 Rodríguez-López J L, Montejano-Carrizales J M, Pal U, et al. Surface reconstruction and decahedral structure of bimetallic nanoparticles. *Physical Review Letters*, 2004, 92(19), 196102
- 120 Migliorato M A, Powell D, Liew S L, et al. Influence of composition on the piezoelectric effect and on the conduction band energy levels of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum dots. *Journal of Applied Physics*, 2004, 96 (9): 5169~5172
- 121 Tersoff J, Tromp R M. Shape transition in growth of strained islands: spontaneous formation of quantum wires. *Physical Review Letters*, 1993, 70(18): 2782~2785
- 122 Shchukin A, Ledentsov N N, Kop'ev P S, et al. Spontaneous ordering of arrays of coherent strained islands. *Physical Review Letters*, 1995, 75(16): 2968~2971
- 123 Ni Y, Soh A K, He L H. Strain-mediated patterning of surface nanostructure by the subsurface island array. *Journal of Crystal Growth*, 2004, 269(2-4): 262~269
- 124 Ni Y, He L H, Song J. Strain-driven instability of a single island and a hexagonal island array on solid substrates. *Surface Science*, 2004, 553 (1-3): 189~197
- 125 Ni Y, He L H. Ramified growth of two-dimensional islands due to misfit strain. *Acta Materialia*, 2003, 51 (14): 4161~4170
- 126 Stangl J, Holý V, Bauer G. Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures. *Reviews of Modern Physics*, 2004, 76(3): 725~783
- 127 Schmidt O G, Eberl K. Multiple layers of self-assembled Ge/Si islands: photoluminescence. Strain fields, material interdiffusion, and island formation. *Physical Review B*, 2000, 61(20): 13721~13729
- 128 Pryor C, Kim J, Wang L W, et al. Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots. *Journal of Applied Physics*, 1998, 83(5): 2548~2554
- 129 Daruka I, Barabasi A L, Zhou S J, et al. Molecular-dynamics investigation of the surface stress distribution in a Ge/Si quantum dot superlattice. *Physical Review B*, 1999, 60(4): R2150~R2153
- 130 Makeev M A, Madhukar A. Stress and strain fields from an array of spherical inclusions in semi-infinite elastic media: Ge nanoinclusions in Si. *Physical Review B*, 2003, 67(7), 073201

ADVANCES IN THE STUDY OF PROPERTIES AND MECHANICS OF SEMICONDUCTOR QUANTUM DOT STRUCTURES*

CHU Haijian^{1,2,†} CHEN Jiankang³ WANG Jianxiang²

¹College of Hydraulic Science and Engineering, Yangzhou University, Yangzhou 225009, China

²Department of Mechanics and Aerospace Engineering, College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, China

³Mechanics & Materials Science Research Center, College of Engineering, Ningbo University, Ningbo 315211, China

Abstract Considerable experimental and theoretical studies have been carried out in semiconductor quantum dots (QDs) in recent years, since quantum-dot devices offer a bright prospect of improved electronic and optical properties due to the zero-dimensional quantum confinement of carriers. The elastic field is essential for the analyses of the physical and mechanical properties of QDs. In this article, the elements of the low-dimensional quantum confined systems, the physical properties and the fabrication techniques of the QDs are reviewed systematically. In particular, the researches on mechanics of the semiconductor QD structures, and the coupling between the elastic field and the physical properties are discussed.

Keywords quantum dot, initial misfit strain, continuum mechanics, finite element method, atomistic simulations

* The project supported by the National Natural Science Foundation of China (10602050, 10525209) and Scientific Research Foundation of Yangzhou University

† E-mail: hjchu@pku.edu.cn, hjchu@pku.org.cn