

应变异质外延生长中的自组织纳米结构^{*}

林志恒^{1†} 龙文达¹ 游建强²

(1 香港理工大学应用物理系 香港)

(2 复旦大学物理系 上海 200433)

摘要 具有纳米尺度的三维岛的阵列能在有应变的外延生长薄膜上自组织生长, 包括反量子点和量子分子在内的其他结构在合适的生长或退火条件下也被观测到. 讨论了有关这些纳米结构自组织生长的动力学蒙特卡罗模拟计算中的最新进展.

关键词 自组织纳米结构, 应变异质外延生长, 动力学蒙特卡罗模拟计算, 新算法

Self-assembled nanostructures in strained heteroepitaxy

LAM ChiHang^{1†} LUNG M T¹ YOU Jian-Qiang²

(1 Department of Applied Physics, Hong Kong Polytechnic University, Hung Hom, Hong Kong, China)

(2 Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China)

Abstract Arrays of nanosized three dimensional islands are known to self assemble spontaneously on strained epitaxial thin films. Other structures including anti dots and quantum molecules have also been observed under appropriate growth or annealing conditions. We discuss recent progress on kinetic Monte Carlo simulations of the self assembly of these structures.

Keywords self assembled nanostructures, strained heteroepitaxy, kinetic Monte Carlo simulations, new algorithm

由于锗 (Ge) 和硅 (Si) 的晶格常数有 4% 的不匹配, 沉积在硅 (100) 面上无位错外延生长的锗薄膜会有压缩应变. 基于较低的表面能, 在少于三个单层的范围内有一个平坦的锗浸润层覆盖在硅表面上. 继续沉积时, 三维锗岛将会自发成形以有效地消除弹性应力^[1]. 这些岛是由四个 (105) 小面围起的金字塔棱锥体, 然后它们将发展成主要受限于 (113) 小面的圆丘形小岛^[2]. 圆丘形岛有较大的高宽比, 更有利于降低应力. 如果继续沉积生长, 将出现有位错的岛. 类似的三维自组织生长结构在诸如 InAs/GaAs 和 InAs/InP 的其他薄膜-衬底体系以及合金体系 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ 和 $\text{In}_k\text{Ga}_{1-k}/\text{GaAs}$ 也被观测到^[3].

因为这些三维小岛是具有独特电学性能的量子点, 其研究引起人们的很大兴趣, 并期待它们今后在微电子器件方面有重要的应用. 其主要优点是, 它们易于制备且不昂贵, 并且该纳米结构常无表面缺陷,

而用与之相竞争的其他技术, 如电子束刻蚀法却难以做到这一点. 自组织结构一个有希望的应用例子则为用于光通信的量子点激光器, 并且在高密度存储芯片和未来的量子计算机上都有可能得到应用.

计算机模拟可以提供关于薄膜生长诸多问题深入、重要的了解. 由于弹性相互作用的长程特性, 用动力学蒙特卡罗方法来模拟计算应变薄膜的形貌演化是一个富有挑战性的科学问题. 一个简单但特别有效的动力学蒙特卡罗方法^[4-6] 是, 在三维数值计算中, 薄膜和衬底用分别代表原子和弹性相互作用的球和弹簧的立方晶格来模拟. 近邻或次近邻成对

^{*} 香港大学教育资助委员会 (HK RGC grant No. PolyU - 5289/02P) 及 香港理工大学 (HK PolyU grant No. G-U197) 资助项目
2006-01-09 收到

[†] 通讯联系人. Email: C.H.Lam@polyu.edu.hk

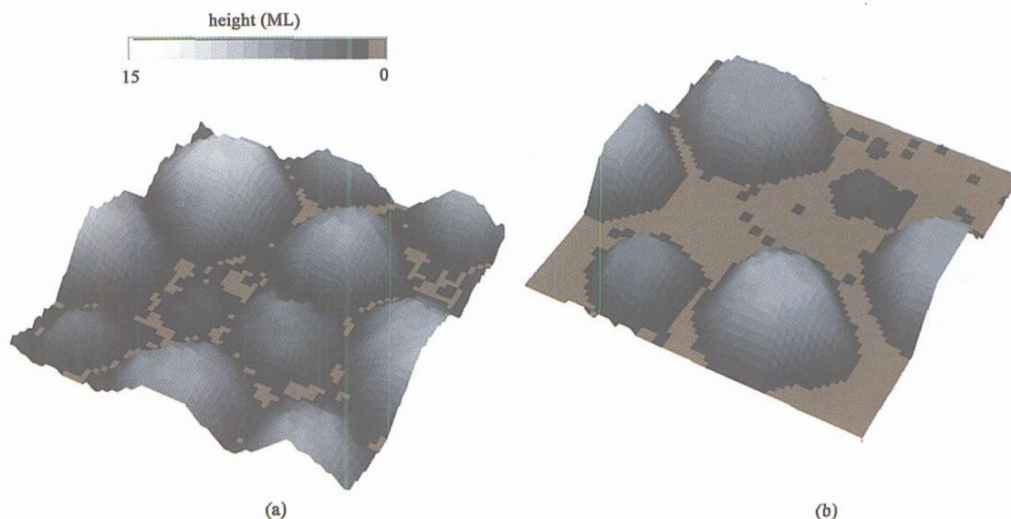


图 1 在 8% 晶格失配下, 模拟薄膜沉积所得的表面构形 (a) 温度为 1000K, 生长速率为 20000 单层每秒; (b) 600K, 10 单层每秒

的球直接耦合, 这给出了系统的弹性能. 另外, 还考虑一个依赖于原子配位数的化学键能的项. 每个表面原子可随机地跳跃到附近的格点上, 该跳跃几率正比于 $\exp(-\Delta E/kT)$. 这里, ΔE 为移动原子时总的能量变化. 物理上来说, 弱键合或者受强应力的原子更容易跳跃. 按照指定的几率来重复模拟原子的跳跃, 可模拟计算薄膜的形貌演化. 从计算量的角度来看, 这是一个非常繁重的任务, 因为一个小岛的形成涉及大量原子的跳跃并因此需要多次计算系统的弹性能.

通过一个改进的、采用格林函数方法的新算法^[3], 大规模动力学蒙特卡罗模拟计算最近变成可能, 因为该方法显著地加速了弹性能的计算. 图 1 显示出通过沉积过程模拟而得到的典型的自组织量子点^[9]. 所用衬底包含 $64 \times 64 \times 64$ 原子、晶格常数为 2.72 \AA 相应的原子密度与硅相同, 而所考虑的晶格失配为 8%. 这可看成是锗薄膜性质的有效外推, 因为这里需要得到足够小的岛来与所考虑的有限晶格相配. 对图 1(a) 和 1(b), 生长温度分别是 1000K 和 600K. 在 1000K, 岛是圆拱型的, 并已弛豫到平衡状态时的形状. 而 600K 时的岛是截头圆锥形的, 它们的高度被高生长层成核势垒所限定.

对更高的沉积速率或在退火条件下, 形貌对温度的依赖性更显著. 图 2 显示出, 在 5% 晶格失配下, 初始为 10 个单层厚的平坦薄膜退火后的结果. 在 1000K 时 (图 2(a)), 岛是密堆的, 而在 600K 时 (图 2(b)), 得到的是由三维小坑演化而来的陡峭的细槽沟. 类似的小坑和细槽沟实验上也已被观察到. 这两

种情形的生长机理不同, 可分别用 Asaro - Tiller - Grinfeld 表面非稳性理论和层成核理论来描述.

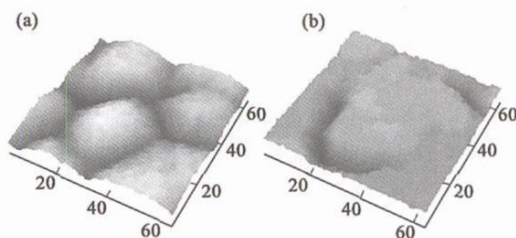


图 2 在 5% 晶格失配下, 初始为 10 个单层厚的平坦薄膜退火模拟所得的表面构形 (a) 温度为 1000K, 时间为 $100 \mu\text{s}$; (b) 600K, 0.25 s



图 3 温度为 723K, 生长速率为 2 单层每秒时, 在 2% 晶格失配下模拟薄膜沉积所得的表面构形 (图中色彩代表平面方向上的压缩应变 u_x)

除量子点、小坑和细槽沟外, 量子点分子是实验上观察到的自组织生长结构的另一个有趣的例子^[7]. 它为由四个三维小岛对称环绕一个三维小坑组成, 在量子元胞自动机方面有潜在的应用. 量子点分子在低晶格失配和高沉积速率时自发生成, 它们可用二维下的动力学蒙特卡罗方法来模拟计算. 这时所用的衬底大得多, 可达 2048 个原子的宽度. 图 3 所展示出的量子点分子, 是在晶格失配为 2% 和额

定薄膜厚度为 80 单层的条件下, 由模拟沉积过程得出^[8,9]. 可以看出每个量子点分子由两个小岛围绕一个小坑组成, 这类似于实验上的三维结构的一个横截面. 由图 3 中的应变分布还易于看出, 小坑降低了小岛的弹性应力, 因此有助于量子点分子的形成.

综上所述, 由于新算法的发展, 使得人们可以利用现有计算机数值模拟计算以前难以处理的、关于应变异质外延生长自组织纳米结构的重要问题, 为研究开辟了新的方向.

参 考 文 献

- [1] Mo Y W, Savage D E, Swartzentuber B S *et al*. Phys Rev Lett, 1990 65 1020
- [2] Ross F M, Trump R M, Reuter M C. Science, 1999 286 1931
- [3] Stangl J, Holy V, Bauer C. Rev. Mod. Phys., 2004 76 725
- [4] Orr B G, Kessler D A, Snyder C W *et al*. Europhys Lett, 1992 19 33
- [5] Lan G H, Lee C K, Sander L M. Phys Rev Lett, 2002 89 216102
- [6] Lung M T, Lan G H, Sander L M. Phys Rev Lett, 2005 95 086102
- [7] Gray J L, Hull R, Fbro J A. Appl Phys Lett, 2002 81 2445
- [8] Gray J L, Hull R, Lan C H *et al*. Phys Rev B 2005 72 155323
- [9] 有关表面演化的电影 参见: <http://apricot.ap.polyu.edu.hk/pit>

· 物理新闻和动态 ·

世界上最小的电冰箱

比利时和美国的两位科学家最近研制出一个由单手征的(或不对称的)分子组成的微观马达. 当将这个马达放在两个具有不同温度的水容器之间时, 马达自动地向一个方向运动来调整热的不均. 这样就将热量从高温的水容器传输到低温水容器中.

在最近的工作中, 他们提出使用外力来驱动这种布朗马达使之向相反的方向运动, 以使热量由冷的区域向温暖的区域流动. 这与家用空调机相似.

研究者所设计的新的冰箱模型使用一种手征棒, 其一端是扁平的而另一端是楔形的, 穿过一层绝热膜. 如果楔形端周围的分子比扁平端周围的分子具有更大的动能, 该手征棒将旋转, 由此将热量由该装置的温暖的一端传输到较冷的一端. 如果将外力施加在棒上, 使马达向相反方向运动, 则会使热量移向相反的方向, 即由较冷的一端移向温暖的一端.

这种电冰箱可以用来冷却半导体贴片元件, 通过对分子施加一扭矩来将能量从贴片的中心移到冷却端口. 它还可用于冷却纳米尺度的机械. 有关论文发表在 Phys Rev Lett 2006 96 210601

(树华 编译自 Physics Web News 6 June 2006)

物理研究中的热门课题

为了对发表的科学论文作一个定量的评估, 美国加州大学圣地亚哥分校的 J Hirsch 博士在去年提出了 h -指数的概念(有关 h -指数的介绍, 本刊发表于 2005 年第 34 卷第 11 期上). 在此基础上, 德国 Max Planck 固体物理研究所的博士研究生 M. Banks 又提出了一个新的思路, 他引进了一个新的 h - b 指数. Banks 认为以前的 h -指数主要是统计了一位科学家所发表的论文被其他论文引用的次数, 从而利用 h -指数的大小来确定出这位科学家发表论文的质量. 现在新的 h - b 指数是对事不对人, 例如一个课题或一个组合, 它具有 h - b 指数为 10 就表示至少有 10 篇有关这个方面的论文被发表, 同时每一篇论文又被其他论文引用过至少 10 次. 这就意味着有关这方面的研究要比其他方面的研究更热门, 更引人注目.

Banks 按年统计出各种课题(或组合)发表的论文数, 然后进行归一化处理, 产生出对应于各种课题(或组合)的一个概率数 m , m 的大小反映了这个研究领域的重要程度, 换句话说, 就是现在有多少科学工作者正活跃地工作在这个领域. 与 h -指数一样, h - b 指数也是通过搜索网络上的数据来获得, 首先是搜索网络数据库内的课题范围, 再分类地计算每一类课题的引文数. 进行了这样繁重的工作后, 才能对固体物理、甚至于整个物理学中各类不同课题作出比较. 在这种统计的基础上, Banks 列出了一张各类课题的 m 值与 h - b 指数. 现列出若干 m 值如下: 碳纳米管 $m=12.85$ 纳米线 $m=8.75$ 量子点 $m=7.84$ 富勒烯(fullerenes) $m=7.78$ 磁阻 $m=6.82$ M -理论 $m=6.58$ 量子计算 $m=5.21$ 碳-60 $m=5.2$.

Banks 认为只要 m 值大于 3 这就是一个热门的研究课题. 如果 m 值大, 同时 h - b 指数也高(大于 100), 那么就表示这是一个从过去一直延续到今天的热门课题. 例如多孔硅和自旋玻璃就属于这一类. 如果 m 值小, 而 h - b 指数高, 这是一类老的课题, 它们持续了多年, 现在正在衰退. 这些新指数将帮助研究生们去选择他们今后的研究方向, 同时也能为各种基金组织对不同领域的研究提供经费时的参考. Banks 也提出, 他的 m 值和 h - b 指数并不是对物理学科中各类课题重要性作评估的唯一标准.

(云中客 摘自 Physics Web, 5 May 2006)