

摘 要

量子点在半导体激光器、光探测器、元胞自动机、单电子晶体管及固态量子计算机等电子及光电子设备中具有巨大的应用前景。采用异质外延生长，在晶格失配的基底上形成纳米尺寸的应变岛，为有效构造高密度的量子点提供了一个迷人的方法。然而，在通常情况下应变岛的空间位置和尺寸分布不具有良好的均匀性，它影响量子点在某些电子及光电子设备中的应用。最近的实验显示，通过重复堆垛岛层和隔离层，量子点的空间有序性和尺寸均匀性都能得到显著的提高。

先前的研究认为在多层生长中，岛的自组装过程是埋藏岛在隔离层表面产生的应变场所致，他们一般把埋藏岛处理成零维的点力偶极子，实际上埋藏岛的线性尺寸和隔离层的厚度大小相当。因此，为了更好地理解多层生长中的自组装过程，必须考虑埋藏岛的尺寸效应。同时，由于晶格失配，表面岛也会在隔离层表面产生应变场，先前所有的研究都忽略了它的作用，事实上在大多数情况下它的作用是不可忽略的。为此，基于连续介质理论，我们开展了如下研究工作：

1. 基于半无限空间中点力偶极子产生的表面应变场的解析式，得到了半无限空间中长方形薄片夹杂物和长方体夹杂物产生的表面静水应变场的解析式。

2. 详细地分析了正方形薄片在隔离层表面产生的应变场，进一步证实了埋藏岛的几何形状对应变场分布具有关键性的影响。只有当隔离层的厚度远大于埋藏岛的线性尺寸时，埋藏岛才能处理成点力偶极子。

3. 发现了在量子点系统中，岛的局部自组装的原因是有限尺寸的埋藏岛引起的表面应变场对岛的形核中心的调制，而不是邻近岛之间的相互排斥作用。合理地选择不同的隔离层厚度和生长温度，可以在埋藏岛上方生长具有对称性分布还是不具对称性分布的岛

团簇。我们的发现为生长有序量子点开辟了一个新的途径。

4. 提出多层生长中岛的自组装过程是埋藏岛和表面岛产生的总应变场共同作用的结果。埋藏岛产生的应变场控制着表面岛的位置，生长的表面岛产生的应变场对控制表面岛的尺寸具有非常重要的影响。我们的理论预言，多层生长后将得到尺寸均匀和空间有序的量子点阵列，成功地说明了实验观测，为进一步提高量子点系统的质量提供了有益的指导。

关键词：生长，自组装，量子点，表面应力，分子束外延

ABSTRACT

Quantum dots have promising technological applications in electronic and photoelectric devices, such as semi-conductor laser, photo-detectors, cellular automata, single-electron transistors and solid state quantum computer et al. Strain-driven formation of nanoscale islands on lattice-mismatched layers in heteroepitaxy offers an attractive way for effective fabrication of coherent quantum dots of large density. Normally, these islands are not well assembled in space and show large dispersion in size distribution. This disadvantage hinders the application of quantum dots in some electronic and photoelectric devices. Recent experiments showed that both the spatial ordering and size uniformity could be greatly improved by growing multilayers of islands separated with spacer layer.

The self-assembly of stacked islands is believed to be the result of the strain fields on spacer layer surfaces induced by embedded islands. Previous studies mostly treated the embedded islands as point force dipoles of zero dimensions. In reality, islands have finite spatial extent with a linear size often comparable to the spacer layer thickness. Finite size of islands must be considered in order to achieve a comprehensive understanding of the self-assembly process. At the same time, surface islands also induce strain on the spacer layer surface and its influence is not negligible in the most case. However, all existing models completely neglect its influence. Based on the continuum theory of elasticity, we have investigated the strain-induced self-assembly in semiconductor quantum-dot systems and obtained following results:

1. Based on the surface strain field induced by point force dipoles in a semi-infinite space, we have obtained analytical solutions for embedded sheet and cuboid.

2. We have detailed analyzed the strain field distribution on the spacer layer surface induced by embedded sheets. Our results further confirmed that the strain fields depend critically on island geometry. Embedded islands can be considered as point force dipoles only as spacer layer thickness much larger than islands size.

3. We have indicated that the underlying mechanism for the local-assembly of islands above embedded islands is due to the strain-induced modulation of nucleation centers instead of the dipole repulsive interaction between adjacent islands. The finite size effect of embedded islands on strain distribution allows growth of a cluster of islands on top of an embedded island with or without symmetrical distributions by choosing appropriate spacer layer thickness and growth temperature. Our finding opens a new avenue to growth of well-assembled quantum-dot molecules.

4. We have proposed a model to elucidate the self-assembly process of islands in multilayer heteroepitaxial growth. The strain field induced by embedded islands controls the location of the surface islands while the compressive strain field induced by surface islands plays a crucial role in controlling the size of islands. The model predicts that islands in successive layers not only form ordered columns but also show uniform distributions of island size and spacing, in agreement with experimental observations.

Key Words: Growth, Self-assembly, Quantum dots, Surface stress, Molecular beam epitaxy

引言

半导体材料与技术是推动信息时代前进的原动力和发动机,是现代高科技的核心与先导。半个多世纪的实践表明信息和技术产业的每一次重大发展都是从半导体材料与技术的进步和革命性突破开始的。

二十一世纪人类将迈进高度信息化的社会,信息的传输、处理和存储将要求空前的规模和速度,如何实现上述信息技术的飞跃,已成为本世纪初所面临的重大科学问题之一。随着科学技术的进步,半导体器件的尺寸越来越小,半导体材料也正经历着从三维体材料向二维量子阱、一维量子线和零维量子点等低维材料的深刻变革,伴随着系统由均匀到非均匀、由线性到非线性和由平衡态到非平衡态的发展。低维半导体量子结构材料是一种人工改性的新型半导体材料,代表着目前半导体科学技术发展的主流方向,在未来的纳米电子学、光电子学、光子学和新一代超大规模集成电路以及光电集成、光集成等方面有极其重要的应用背景,可能引发新的技术革命。

理论和实验表明载流子的空间维度限制使低维半导体材料具有优异的光学和电学性质^[1,2],因此,对载流子施以尽可能多的空间限制,发展零维度的量子点系统是近年来低维半导体量子结构研究的重中之重。例如,三维受限的零维量子点激光器^[1]相对于一维受限的量子阱激光器具有更低的阈值电流密度,更高的温度稳定性,更高的增益与调制带宽,更窄的线宽和无啁啾工作等优越的性能。半导体量子点具有典型的零维系统的电子特性,不同于块体材料的连续光谱,电子态密度由 δ 峰组成,电子光谱类似于原子的电子光谱,这种特性使得半导体量子点在半导体激光器、光电探测器、单电子晶体管、单电子存储器、单声子发射器、固态量子计算器及元胞自动机等电子及光电子设备中具有巨大的应用前景。然而,多数电子及光电子设备的应用要求半导体量子点具有形状一致、尺寸均匀和位置有序的特性。因此,探索如何获取有序的半导体量子点

系统成了当今国际上研究的焦点。

目前,微印技术难以制备小而密集的量子点,全球为数不多的几个实验室利用电子束刻蚀能得到理想的半导体量子点,但是代价昂贵且难以批量生产。这迫使人们寻求低价而高效的新方法。通过 Stranski-Krastanov 生长模式,当一种半导体材料沉积在另一种小晶格失配的半导体材料上时^[3-5](如 InAs/GaAs),由于应变松弛效应,将自发地形成无位错的岛阵列。当岛阵列被与基底相同的材料覆盖时即形成量子点,美中不足的是这样得到的量子点的空间位置和尺寸分布不具有良好的均匀性。最近的实验发现^[6-14],通过合理的选择生长温度、隔离层厚度及沉积速度等参数,运用重复堆垛岛层和隔离层的方法,量子点的尺寸均匀性和位置有序性都能得到显著提高。

受应用研究的激励,多层生长中自组装过程的机理也成了人们广泛研究的热点^[6-17]。通过对自组装机理的认识,有效地选择生长参数,可获得性能更好的量子点,避免盲目实验带来人财物力的浪费,同时也能进一步加深对纳米科学的认识,对基础科学研究具有重要的意义。先前的研究认为多层生长中的自组装过程是埋藏岛在隔离层表面产生的应变场所致^[6-17],通过把埋藏岛处理成零维的力偶极子,他们定性地解释了当时的实验现象^[6,7,15,16]。实际上,埋藏岛的线性尺寸和隔离层厚度大小相当,埋藏岛具有尺寸效应,而且埋藏岛产生的应变场也会影响量子点设备的光电子特性^[18]。因此,为了更好的理解多层生长的自组装过程及量子点设备的光电子特性,人们迫切需要得到不同形状埋藏岛产生的应变场。有三种方法用来计算不同形状埋藏岛产生的应变场:(1)有限元计算方法^[19,20];(2)原子尺度的大规模计算模拟如分子动力学方法^[21,22];(3)连续介质理论中的格林函数方法^[20,23-26]。方法(1)和(2)尽管能准确计算埋藏岛产生的应变场,但是都涉及到复杂且昂贵的计算机模拟过程。

连续介质理论中的格林函数方法能简单高效地计算埋藏岛产生的应变场,且解析表达式能让人们对物理本质有更深的洞察。尽

管先前人们对连续介质理论在半导体量子点系统中的有效性存在怀疑,但是,最近钟建新等人的研究成功地证明它在半导体量子点系统中的有效性^[24],发现格林函数方法得到的结果和大规模计算模拟得到的结果完全类似。格林函数方法的缺陷是难以得到不同形状埋藏岛产生的应变场的解析式,尤其是各向异性系统。因此,如何获得不同形状埋藏岛产生的应变场的解析式成了人们研究的焦点。在我们的表面生长研究中,则关心表面应变场的影响。

应变场的分布依赖埋藏岛的形状^[22,24]。实验报导^[4,5]当生长温度较低时,岛的形状多为金字塔形。然而,最近的研究显示^[18,27,28],在表面岛被覆盖的过程中,岛将与周围材料形成互扩散,岛的底部面积增大、高度减小,形成较平整的埋藏岛。先前人们多数是计算金字塔形岛产生的应变场,我们认为把埋藏岛处理成薄块更符合实际情况。

最近的实验^[14]显示当岛的高度接近隔离层厚度时,降低生长温度,有序的岛团簇将出现在埋藏岛的上方。G. Capellini 等人^[14]认为是邻近表面岛之间的相互作用引起的,但这不能解释为什么表面岛和埋藏岛具有同样的取向和对称性。

由于晶格失配,表面岛也会产生应变场,而且表面岛产生的表面应变场的大小和埋藏岛产生的表面应变场的大小经常可相比拟。以前所有关于多层生长中的自组装过程的讨论中^[6-17],人们仅考虑了埋藏岛产生的表面应变场。

基于上述分析,我们开始了有关量子点自组装生长的理论研究。首先,我们在第一章中介绍了量子点的生长模式、形状及多层生长中的自组装现象;其次,我们在第二章中尝试着推导了长方形薄块和长方体埋藏岛产生的表面应变场;然后,我们在第三章中分析了埋藏薄块引起的表面应变场分布;最后,在第四章中我们试图找出引起局部自组装生长的真正原因,期望证实多层生长中的自组装过程是埋藏岛和表面产生的应变场共同作用的结果,进一步揭示自组装生长的机制。

第一章 绪 论

自发地在固体表面形成微观上有序的周期性结构是一个普遍的自然现象,早在 1960 年 Landau 和 Lifshits 的《<Electrodynamics of Continuous Media>>一书中就介绍了该现象。受益于精度日益提高的实验设备如透射电子显微镜 (TEM)、扫描隧道显微镜 (STM) 及原子力显微镜 (AFM), 最近几年, 在晶体表面形成微观上有序的周期性结构成了人们广泛研究的热点^[1,2]。这是因为自发地在半导体表面形成有序的周期性结构为人类直接构造半导体纳米结构——窄带隙材料埋藏在宽带隙材料中提供了可能, 它为电子在导带、空穴在价带提供了限域势。这种周期性结构被与基底相同的材料覆盖即形成了量子井、量子线或量子点。

特别是量子点, 它具有典型零维系统的光电特性, 电子态密度由 δ 峰组成, 和块体材料的连续光谱不同, 具有类似于原子的光谱特性。量子点类似于原子的光谱特性, 可广泛地应用到半导体激光器, 光电探测器, 单电子晶体管, 单电子存储器, 单电子发射器, 固态量子计算器及元胞自动机等多种光子、电子及光电子设备中去^[1,2], 故量子点成了近年科学研究中炙手可热的领域。然而, 大多数设备的应用要求半导体量子点具有尺寸均匀、形状一致和位置有序的特性, 而通过自组装方法直接在半导体表面形成的量子点的尺寸分布和空间位置仍然具有较大的随机性。因此, 如何进一步提高量子点的有序性成了近期科学研究的焦点。全球各大实验室提出了电子束刻蚀、多层生长等有效的方法, 电子束刻蚀方法代价昂贵且不能批量生产, 多层生长因低价高效而备受关注。

下面我们将简要地介绍异质外延生长中半导体量子点的生长模式、形状及多层生长时的自组装现象。

第一节 半导体量子点的 Stranski-Krastanow 生长模式

根据生长的平衡理论,在异质外延生长中,有三种不同的生长模式:FM 模式(Frank 和 van der Merwe, 1949)、VW 模式(Volmer 和 Weber,1926)和 SK 模式(Stranski 和 Krastanow,1937)。它们能分别描述为一层接一层的二维平面生长、三维岛生长以及二维平面生长加三维岛生长,如图 1-1 所示。

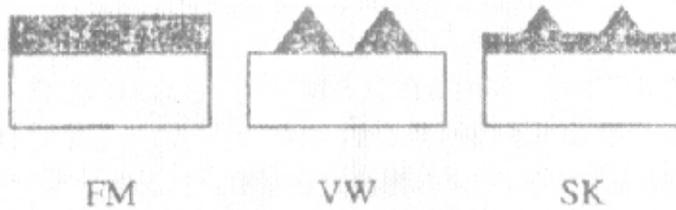


图 1-1: 异质外延系统中三种不同的生长模式: FM(Frank-van der Merwe)模式, VW(Volmer-Weber)模式和 SK(Stranski-Krastanow)模式。

不同的生长模式依赖于系统的表面能、截面能和晶格失配。在晶格匹配的系统里,生长模式主要由表面能和界面能决定。如果外延层的表面能和界面能之和小于基底的表面能,则形成 FM 生长模式;反之,如果外延层的表面能和界面能之和大于基底的表面能,则形成 VW 模式。在晶格失配的系统里,如果应变的外延层和基底间的界面能较小,则最初会出现一层接一层的二维平面生长,但是随着薄膜厚度的增加,它的应变能也越来越大,当达到某一临界值时,为了释放其中的应变能,会在薄膜的上面长出三维岛,形成 SK 生长模式。

人们最初认为,通过 SK 生长模式形成的三维岛含有位错结构,然而,1985 年 Goldstein^[3]等人的实验发现 InAs/GaAs(001)系统中的三维岛是完全内聚的,即不含位错结构。后来,1990 年 Eaglesham^[4]等和 Mo^[5]等又相继发现 Ge/Si 系统中的三维岛也是完全内聚不含位错的应变岛。后来大量的实验证明半导体异质结构,例如 Ge(SiGe)

/Si, InAs (InGaAs)/GaAs, PbSe/PbEuTe 等, 都会形成无位错的三维内聚岛。原因是这样的, 比如 Ge/Si 系统, Ge 和 Si 具有相同的晶体结构, 不同的原子间距离, 且原子间距离之差 (晶格失配) 较小 (约为 4%)。当 Ge 沉积到 Si 基底上时, 形成内聚的无位错应变岛较位错岛在能量上更为有利, 当晶格失配较大时, 则会形成位错岛。事实上, 形成内聚岛还是位错岛不仅与晶格失配有关, 而且还与系统的表面能、界面能及生长温度等有重要的关系, Vanderbilt 和 Wickham^[29]从理论上对外延生长中形成位错岛还是内聚岛给出了详细的说明。

当内聚岛形成以后, 为了减少总的表面能, 也就是说为了减少系统的总能量, 一般认为它们会经历奥斯特瓦尔德熟化 (Ostwald ripening), 这个熟化过程意味着大岛继续长大, 而小岛将慢慢消失。随着时间的推移, 它会使岛具有一个很大的尺寸分布, 同时, 岛的平均尺寸增大、密度减小, 当岛的体积达到某一临界尺寸时, 就会形成位错或是出现塑性松弛, 进一步加速岛的生长。然而, 令人惊奇的是, 实验发现内聚的三维岛比如 InGaAs/GaAs(001)^[30], InAs/GaAs(001)^[31,32]具有很窄的尺寸分布, 它们根本不会经历奥斯特瓦尔德熟化, 紧接着, 人们发现在很多的异质外延系统包括 InAs/InP(001)^[33], AlInAs/GaAlAs(001)^[34], Ge(Si)/Si(001)^[35,36]及 CdSe/ZnSe(001)^[37]等所形成的三维岛都有一个很窄的尺寸分布。特别值得指出的是, 1996 年 Grundmann^[38]等人发现在 InAs/GaAs 系统中, 与 InAs 的沉积量无关, 岛都达到相同的尺寸 (14nm), 而且相邻的岛之间显示出很强的四方形关联排列。所有的这些实验都表明, 在小晶格失配的半导体异质结构中, 存在着自组装的生长机制。当这些小岛被与基底相同的材料覆盖时即得到量子点, 可实现电子的三维限制, 能广泛地应用到各种电子及光电子设备中去。

关于三维岛的自组装生长、缺少奥斯特瓦尔德熟化。热力学理论认为: 在某种情况下晶格失配异质外延系统的平衡态是一个有序的三维内聚应变岛阵列, 不会出现奥斯特瓦尔德熟化; 动力学理论认为: 三维岛形成以后, 有一个朝奥斯特瓦尔德熟化的趋势, 但是

当岛的尺寸大于某一临界值后,其生长就会动力学地减慢(即所谓的动力学自限制生长)。有人认为主要由动力学过程控制^[39],有人则认为主要由热力学过程控制^[40],最近 M. Meixner 等人认为是从动力学控制转变为热力学控制^[41]。

第二节 生长参数对表面岛大小形状的影响

表面岛的大小及形状主要由生长温度、沉积速率、沉积物质的量及晶格失配的大小等参数决定。生长温度是影响表面岛形状的重要参数。例如 Ge/Si 量子点系统^[42,43],在生长温度较低时,比如 500°以下,主要是底部为矩形、侧面为(105)面的棚屋形(hut)小岛和底部为正方形、侧面为(105)面的金字塔形(pyramid)岛;在 500°至 750°,主要是金字塔形岛和底部为圆形的多侧面圆屋顶形(dome)岛,而且温度对两种岛的比例大小有重要影响^[44];当温度大于 750°则会逐渐出现位错岛。棚屋形岛的尺寸一般在 30nm 以下,金字塔形岛的尺寸一般在 20nm 与 50nm 之间,圆屋顶形岛的尺寸则一般在 50nm 以上。图 1-2 是金字塔形岛和圆屋顶形岛的 AFM 图像。

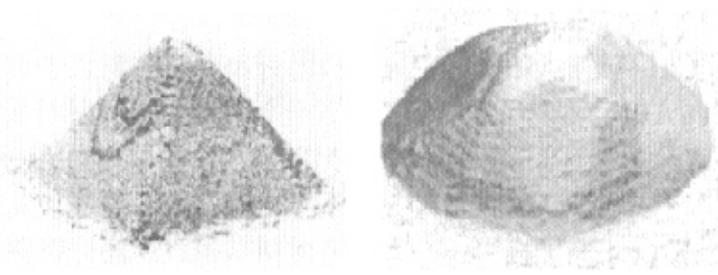


图 1-2: 金字塔形岛 (pyramid)

引自文献[45]

圆屋顶形岛 (dome)

引自文献[42]

沉积物质的量对表面岛的大小形状也有较大影响,但是对于不同系统影响却不太一样。例如 Ge/Si 量子点系统,在合适的生长温

度,随着沉积量的增加,Ge量子点的形状经历从棚屋形到金字塔形然后到圆屋顶形直至最后出现位错结构^[46],当然在很多情况下都是两种模型共存;对于PbSe/PbTe量子点系统,人们发现沉积量对PbSe量子点的形状影响很小,但是随着沉积量的增加PbSe量子点的尺寸会逐渐增大^[47];然而,对于InAs/GaAs量子点系统,人们发现当沉积量在某一范围内,InAs量子点的大小和尺寸与沉积量无关^[38]。沉积速率也会影响量子点的尺寸,一般沉积速率越大量子点的尺寸就越小^[46]。

晶格失配的大小对量子点的大小形状有非常重要的影响^[48,49]。如果晶格失配太大比如超过10%则一般不能够形成内聚的无缺陷岛。在小晶格失配情况下,晶格失配越大,得到的量子点就越小,量子点的尺寸分布就越窄。比如,InAs/GaAs的晶格失配7.2%大于Ge/Si的晶格失配4.2%,在相同生长条件下,InAs量子点一般小于Ge量子点且前者具有更窄的尺寸分布^[32,42]。

另外,值得指出的是在生长过程中为了释放应变能,基底材料和表面岛之间存在互扩散^[50,51]。它们能裁剪量子点的光电特性。因此,精确理解和控制量子点的组成也是非常重要的研究^[52-54]。

第三节 多层生长中半导体量子点的自组装

尽管直接在半导体表面自组装生长量子点能够得到较为有序的纳米结构,但是其尺寸分布和空间位置仍然具有较大的随机性。许多潜在的应用要求更好的尺寸均匀性和空间有序性。为了提高其有序性,人们提出了不同的方法:(a)多层生长^[6-13];(b)人工构造表面应力场,例如在基底中使用离子注入构造位错网络^[55],在刻蚀后的规则表面上沉积内聚应变层^[56-58];(c)利用不同晶面上原子的扩散速度不同,使用纳米刻蚀构造不同的晶面^[59];(d)利用岛能更好的松弛,在小平台的角上、边上,选择性生长在刻蚀的规则图案基底上^[60-62]。不同方法都具有自身的优缺点。后三种方法涉及到纳米刻蚀或者离子注入,使用纳米刻蚀方法如电子束刻

蚀，人们能获得非常有序的量子点，然而，刻蚀非常昂贵、难于批量生产，而且刻蚀后不平的表面将限制设备的结构和生产过程。离子注入适合将来的工业化生产，但注入离子会影响设备的光电子性能。

多层生长方法是个令人激动的方法，随着堆垛层数的增加（SK层加隔离层（Spacer Layer），岛的尺寸均匀性和空间有序性都得到了巨大的提高^[6-13]，图 1-3 显示第一层和第二十五层 SiGe 岛的表面 AFM 图像。多层生长方法的难点是如何合理地控制生长温度、隔离层厚度及沉积速度等各种生长参数以便获取理想的量子点阵列。另外，值得一提的是有些设备应用要求多层量子点结构^[1,63]。

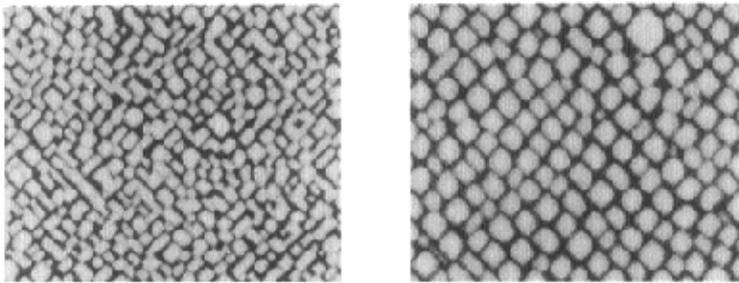


图 1-3： 第一层（左）和第二十五层（右） SiGe 岛的 AFM 图像

引自文献[7]

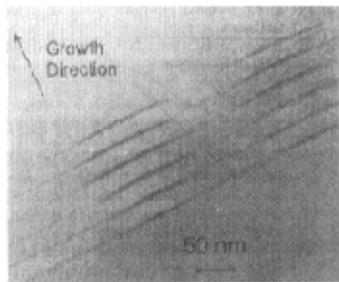
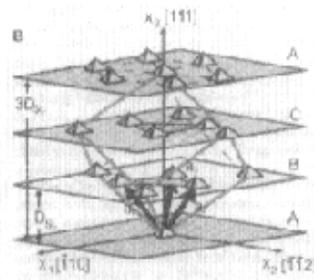


图 1-4： Ge/Si 多层结构的垂直关联

引自文献[2]



PbSe/PbEuTe 多层结构的面心立方状关联

引自文献[12]

伴随着有序性程度的提高, TEM 图像显示, 在 InAs/GaAs ^[6,10]、 Ge/Si ^[7-9] 等多层结构中量子点之间呈现垂直关联特性, 后来人们发现在磁性系统, 如 Co/Au ^[64] 也呈现垂直关联的特性, 而在各向异性很强的系统如 $\text{CdZnSe}/\text{ZnSe}$ ^[11]、 $\text{PbSe}/\text{PbEuTe}$ ^[12,13], 则分别出现位置反关联和面心立方状关联方式。图 1-4 显示 Ge/Si 多层结构的垂直关联和 $\text{PbSe}/\text{PbEuTe}$ 多层结构的面心立方状关联。

不同于以上提到的各种关联特性, 最近科学家们惊喜地发现^[14], 通过巧妙地利用生长温度和隔离层厚度, Ge/Si 量子点会出现局部自组装——大的量子点上面长出四个和它具有相同对称性和取向的量子点团簇。具体是这样的, G. Capellini 等人^[14]首先在较高的生长温度下沉积了 10 个周期的 Si/Ge 结构, 获得排列有序的 Ge 岛阵列, 然后在降低隔离层厚度和生长温度的情况下沉积 Ge , 于是在埋藏岛上面得到了有序的量子点团簇。这样的团簇可用来充当元胞自动机中的基胞^[65], 用于构造各种新奇的微电子设备。图 1-5 显示 Ge/Si 量子点的局部自组装。

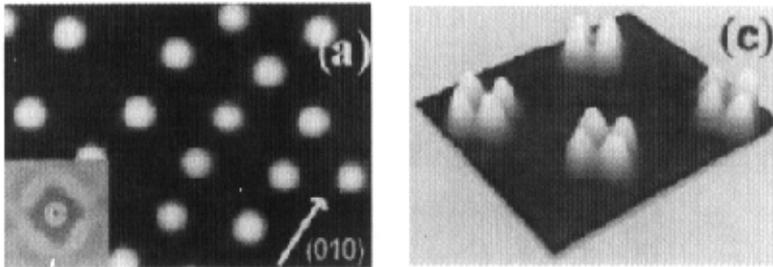


图 1-5: 左图: 沉积 10 周期 Si/Ge 结构后 Ge 岛的表面 AFM 图; 右图: 降低生长温度和隔离层厚度后得到的局部自组装图像。引自文献[14]

另外, 在表面岛被覆盖的过程中, 岛和周围材料间存在着互扩散^[27,28,66-68], 某些情况下它的大小、形状、成分都可能发生很大变化, 如何控制互扩散也是一个重要的问题。

量子点的广泛应用前景及各种新奇的实验发现, 引起了全球实验科学家的广泛兴趣, 同时也激起了理论工作者的无比热情。理论

研究试图揭示自组装深刻的生长机理，解释已有的实验现象，找到合理的生长参数，进一步提高各种具有不同应用价值的量子点的质量，避免盲目实验带来的人财物力的浪费，同时通过对生长机理的深刻认识，预言新的实验发现，进一步推广量子点在光电子领域的应用。

第四节 本论文的主要研究内容

先前的研究认为，在多层生长中，岛的自组装过程是埋藏岛在隔离层表面产生的应变场所致，他们一般把埋藏岛处理成零维的点力偶极子，实际上埋藏岛的线性尺寸和隔离层的厚度大小相当，埋藏岛的形状对应变场的分布具有关键性的影响。我们认为，为了更好地理解多层生长中的自组装过程，应当考虑埋藏岛的尺寸效应。同时，由于晶格失配，表面岛也会在隔离层表面产生应变场，先前的研究都忽略了它的作用，事实上，大多数情况下，表面岛在隔离层表面产生的应变场的作用是不可忽略的。

本论文基于连续介质理论格林函数方法，从应变场的角度出发，研究了半导体量子点系统的自组装现象。在第二章中，基于半无限空间中点力偶极子产生的表面应变场的解析式，我们导出了半无限空间中长方形薄片夹杂物和长方体夹杂物产生的表面静水应变场的解析式；然后，在第三章中，我们基于二维薄片产生的表面静水应变场的解析式，具体分析了埋藏薄片引起的表面应变场分布，同时还详细地分析了金字塔形埋藏岛引起的表面应变场分布（导师的研究工作），证实了埋藏岛的几何形状对应变场分布具有关键性的影响；最后，在第四章中，我们阐明，在量子点系统中，岛的局部自组装的原因是有限尺寸的埋藏岛引起的表面应变场对岛的形核中心的调制，而不是邻近岛之间的相互排斥作用，多层生长中岛的自组装过程是埋藏岛和表面岛产生的总应变场共同作用的结果，成功地说明了实验观测。

第二章 半无限空间中埋藏岛产生的应变场

埋藏的内聚应变岛（量子点）会在系统中产生应变场，应变场将影响系统的光电子特性^[18]，同时也是导致多层异质外延生长中自组装现象的根本原因。为了深刻地理解各种新奇的实验发现，进一步提高量子点元器件的性能，人们需要准确的计算埋藏岛所产生的应变场。

有三种方法用来计算埋藏岛产生的应变场：（1）有限元计算方法^[19,20]；（2）原子尺度的大规模计算模拟如分子动力学方法^[21,22]；（3）连续介质理论中的格林函数方法^[20,23-26]。

方法（1）和（2）能准确地计算埋藏岛产生的应变场，是人们常用的方法。然而，它们都涉及到复杂的计算机模拟过程。方法（1）要求仔细的选取边界条件，且经常需要在广义坐标下进行插值，使计算变得非常麻烦^[26]。方法（2）要求精确的原子间势，且目前计算机的能力还只能计算相对较小的量子点系统。方法（3）的优点是能简单高效地计算埋藏量子点产生的应变场，且解析表达式能让人们更好地理解系统的物理本质。先前人们对连续介质理论在量子点系统中的有效性存在争议，最近钟建新教授等人的研究成功地证明它的有效性，发现格林函数方法得到的结果和大规模计算模拟得到的结果完全类似^[24]。

格林函数方法的缺陷是难以得到不同形状埋藏岛产生的应变场的解析式，尤其是各向异性系统。当系统的各向异性较弱时，如 Ge/Si、InAs/GaAs，人们通常把它们处理成各向同性系统。先前的研究中，人们一般把埋藏岛处理成零维的点力偶极子^[6,7,10,15]。运用点力偶极子产生的应变场，他们成功地解释了一些实验现象。实际上埋藏岛有尺寸效应，应变场的分布对埋藏岛的形状具有很强的依赖关系^[22,24]，为了更好的理解应变场的分布，必须考虑埋藏岛的具体形状。

基于零维点力偶极子产生的表面应变场，我们将详细推导埋藏的长方形薄块及长方体在固体表面产生的静水应变场的解析式。

第一节 零维点力偶极子产生的应变场

固体中的夹杂物会产生应力场，它可以是由于材料中某处的温度不同于周围材料而引起的热膨胀，也可以是由于某种材料埋藏在另一种材料中它们的晶格常数不同而引起的晶格失配，比如 Ge 岛埋藏在 Si 材料中。如图 2-1 所示，当材料的某部分 Ω 升高温度到 T 时，由于周围材料的约束，它将在材料中引起热应力 σ_{ij} 。当热膨胀为 αT 时，引起的热膨胀应变为：

$$\varepsilon_{ij}^* = \delta_{ij} \alpha T \quad (2.1.1)$$

其中 α 是线性热膨胀系数， δ_{ij} 是 Kronecker delta。热膨胀应变是解除周围材料的约束后 Ω 自由伸展的应变。

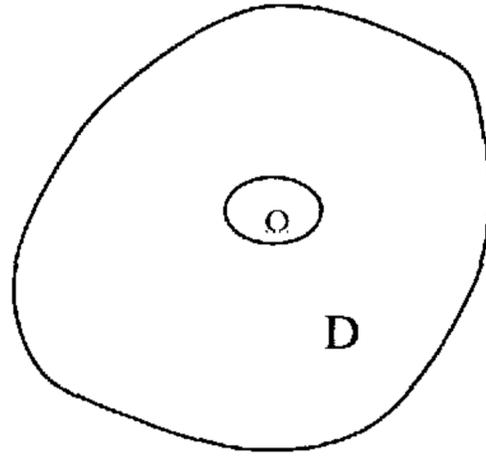


图 2-1: 夹杂物 Ω

实际上应变是热膨胀应变和弹性应变之和。热膨胀应变 (2.1.1) 人们称它叫本征应变^[69]。当然，在本征应变、应力理论中，本征应变 ε_{ij}^* 不一定是由于热膨胀引起的，它可以是由于晶格失配，相变，塑性形变等原因引起的。

下面我们讨论如何解夹杂物 Ω 产生的应变场的问题。一个自由体 D (没有任何外部表面力和体力作用的物体) 中某夹杂物的本征应变为 ε_{ij}^* ，设它在任意一点 $\mathbf{x}(x_1, x_2, x_3)$ 处引起的位移为 u_i ，应变为 ε_{ij} ，应力为 σ_{ij} 。

总的应变 ε_{ij} 是弹性应变 e_{ij} 和本征应变 ε_{ij}^* 之和，

$$\varepsilon_{ij} = e_{ij} + \varepsilon_{ij}^* \quad (2.1.2)$$

又在弹性理论中,

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (2.1.3)$$

由胡克定律, 可得:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}e_{kl} = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^*) \quad (2.1.4)$$

或者是:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}(u_{k,l} - \varepsilon_{kl}^*) \quad (2.1.5)$$

其中 C_{ijkl} 是弹性张量, 且使用了爱因斯坦求和约定, 即如果在表达式的某项中, 某指标重复的出现两次, 则表示要把该项在该指标的取值范围内遍历求和。因 C_{ijkl} 是对称的 ($C_{ijkl} = C_{jilk}$), 则 $C_{ijkl}u_{l,k} = C_{ijkl}u_{k,l}$ 。在区域 $D-\Omega$ 中, $\varepsilon_{ij}^* = 0$, (2.1.5)变成:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} = C_{ijkl}u_{k,l} \quad (2.1.6)$$

接下来我们看它的平衡方程。这里考虑的是自由体的情况, 即材料不受任何的外力和表面力的作用。如果不是自由体, 则应力场应该是自由体的本征应力与适当边界条件问题解的叠加。

平衡方程为:

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (i=1,2,3) \quad (2.1.7)$$

不受外部表面力作用的边界条件是:

$$\sigma_{ij}n_j = 0 \quad (2.1.8)$$

其中 n_i 是 D 边界上方向朝外的单位法向矢量。

通过把方程(2.1.5)代入方程(2.1.7)和(2.1.8), 可以得到:

$$C_{ijkl}u_{k,lj} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl,j}^* \quad (2.1.9)$$

和

$$C_{ijkl}u_{k,l}n_j = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^*n_j \quad (2.1.10)$$

从方程(2.1.9)和(2.1.10), 我们发现本征应变 ε_{ij}^* 对平衡方程的作用类似于体力对平衡方程的作用, 因为受体力 X_i 作用本征应变为零的物体的平衡方程是 $C_{ijkl}u_{k,lj} = -X_i$ 。相似的, $C_{ijkl}u_{k,l}n_j$ 类似于表面力在边界上的作用。因此, 可以认为自由体内 ε_{ij}^* 引起的弹性位移场等同于体力为 $-C_{ijkl}\varepsilon_{kl,j}^*$, 表面力为 $C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^*n_j$ 对物体的作用。

一般夹杂物 Ω 远小于块体 D , 我们可以把 D 看成无限体或是半

无限体。

计算夹杂物 Ω 产生的应变场需要运用格林函数方法。基于本论文的讨论对象，这里仅考虑半无限空间中夹杂物产生的应变场。图 2-2 是半无限空间中距离表面为 d 的夹杂物 Ω 的示意图。

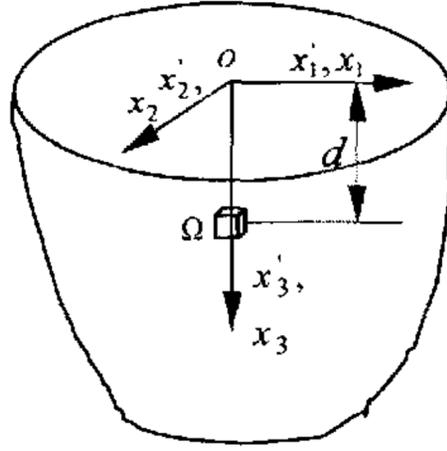


图 2-2: 半无限空间中距离表面为 d 的夹杂物 Ω

半无限空间的格林函数 $G_{ij}(x, x')$ 定义如下:

对于 $x_3 > 0$,

$$C_{ijkl}G_{km,l}(x, x') + \delta_{im}\delta(x, x') = 0 \quad (2.1.11)$$

对于 $x_3 = 0$,

$$C_{ijkl}G_{km,l}(x, x') n_j = \delta_{im}\delta_s(x, x') \quad (2.1.12)$$

其中 $G_{km,l}(x, x') = (\partial/\partial x_l) G_{km}(x, x')$, n_j 是 $x_3 = 0$ 表面的单位外法向矢量。 $\delta(x, x')$ 和 $\delta_s(x, x')$ 分别是三维、二维情况的 Dirac delta 函数, 它们具有如下特性:

$$\int_0^\infty f(x')\delta(x, x')dx' = f(x)$$

及

$$\int_S f(x')\delta_s(x, x')dS(x') = f(x) \quad (x_3 = 0)$$

其中 S 是 $x_3 = 0$ 的平面, $x \neq x'$ 时 $\delta(x, x') = \delta_s(x, x') = 0$ 。 $G_{ij}(x, x')$ 是 x_j 方向的单位体力作用在点 x' 处在点 x 处引起的沿 x_i 方向的位移分量。

由方程(2.1.9)及(2.1.10), 位移 u_i 可以认为是 x_i 方向的体力 $-C_{jlmn}\varepsilon_{mn,j}^*$ 所引起的。因为格林函数 $G_{ij}(x, x')$ 是 x_j 方向的单位体力引起的位移分量, 且具有对称性。所以,

$$u_i(x) = -\int_{-\infty}^\infty G_{ij}(x-x')C_{jlmn}\varepsilon_{mn,l}^*(x')dx' \quad (2.1.13)$$

假定边界项消失, 通过分步积分得到:

$$u_i(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} C_{\mu mn} \varepsilon_{mn}^*(\mathbf{x}') G_{ij,l}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (2.1.14)$$

因此, 在半无限空间中 ε_{ij}^* 引起的位移 $u_i(\mathbf{x})$ 为:

$$u_i(\mathbf{x}) = \int_0^{\infty} C_{\mu mn} \varepsilon_{mn}^*(\mathbf{x}') G_{ij,l}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (2.1.15)$$

容易证明(2.1.15)满足平衡方程(2.1.9)和边界条件(2.1.10)。

1953年 Mindlin 和 Cheng^[70,71] 找出了半无限空间的格林函数 $G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, 它们是:

$$\begin{aligned} G_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)} \left[\frac{3-4\nu}{R_1} \delta_{ij} + \frac{1}{R_2} \delta_{ij} + \frac{(x_i - x'_i)(x_j - x'_j)}{R_1^3} + \right. \\ &\quad \left. \frac{(3-4\nu)(x_i - x'_i)(x_j - x'_j)}{R_2^3} + \frac{2x_3 x'_3}{R_2^3} \left\{ \delta_{ij} - \frac{3(x_i - x'_i)(x_j - x'_j)}{R_2^2} \right\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{4(1-\nu)(1-2\nu)}{R_2 + x_3 + x'_3} \left\{ \delta_{ij} - \frac{(x_i - x'_i)(x_j - x'_j)}{R_2(R_2 + x_3 + x'_3)} \right\} \right] \\ G_{3j}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{(x_j - x'_j)}{16\pi\mu(1-\nu)} \left[\frac{(x_3 - x'_3)}{R_1^3} + \frac{(3-4\nu)(x_3 - x'_3)}{R_2^3} \right. \\ &\quad \left. - \frac{6x_3 x'_3 (x_3 + x'_3)}{R_2^5} + \frac{4(1-\nu)(1-2\nu)}{R_2(R_2 + x_3 + x'_3)} \right] \quad (2.1.16) \\ G_{i3}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{(x_i - x'_i)}{16\pi\mu(1-\nu)} \left[\frac{x_3 - x'_3}{R_1^3} + \frac{(3-4\nu)(x_3 - x'_3)}{R_2^3} \right. \\ &\quad \left. + \frac{6x_3 x'_3 (x_3 + x'_3)}{R_2^5} - \frac{4(1-\nu)(1-2\nu)}{R_2(R_2 + x_3 + x'_3)} \right] \\ G_{33}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)} \left[\frac{3-4\nu}{R_1} + \frac{8(1-\nu)^2 - (3-4\nu)}{R_2} + \frac{(x_3 - x'_3)^2}{R_1^3} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(3-4\nu)(x_3 + x'_3)^2 - 2x_3 x'_3}{R_2^3} + \frac{6x_3 x'_3 (x_3 + x'_3)^2}{R_2^5} \right], \quad i, j = 1, 2, \end{aligned}$$

其中

$$R_1^2 = (x_1 - x'_1)^2 + (x_2 - x'_2)^2 + (x_3 - x'_3)^2,$$

$$R_2^2 = (x_1 - x'_1)^2 + (x_2 - x'_2)^2 + (x_3 + x'_3)^2,$$

μ 是剪切模量, ν 是泊松比。

当给定区域 Ω 中的本征应变 ε_{ij}^* , 由方程(2.1.15)可以得到位移场

u_i 。如果 ε_{ij}^* 是常数，则方程(2.1.15)变为：

$$u_i(\mathbf{x}) = C_{jlmn} \varepsilon_{mn}^* \int_{\Omega} G_{ij,l}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (2.1.17)$$

对于均匀的膨胀本征应变，或者由于小的晶格失配引起的本征应变，比如 Ge 岛埋藏在 Si 材料中，

$$\varepsilon_{ij}^* = \delta_{ij} \varepsilon^* \quad (2.1.18)$$

将(2.1.16)和(2.1.18)代入方程(2.1.17)得到：

$$u_i(\mathbf{x}) = \frac{\varepsilon^*(1+\nu)}{4\pi(1-\nu)} \int_{\Omega} \left[-\left(\frac{1}{R_1}\right)_{,i} + (3-4\nu)(2\delta_{ij} - 1)\left(\frac{1}{R_2}\right)_{,i} - 2x_3\left(\frac{1}{R_2}\right)_{,3i} \right] d\mathbf{x}' \quad (2.1.19)$$

其中 $\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{R_1}\right) = \left(\frac{1}{R_1}\right)_{,i}$ 。

由此，半无限空间中本征应变为 ε^* 的点夹杂物（即零维的点力偶极子）产生的位移场为：

$$u_i(\mathbf{x}) = \frac{\varepsilon^*(1+\nu)}{4\pi(1-\nu)} \left[-\left(\frac{1}{R_1}\right)_{,i} + (3-4\nu)(2\delta_{ij} - 1)\left(\frac{1}{R_2}\right)_{,i} - 2x_3\left(\frac{1}{R_2}\right)_{,3i} \right] \quad (2.1.20)$$

坐标 x, y, z, x', y', z' 分别代替 $x_1, x_2, x_3, x'_1, x'_2, x'_3$ ，由方程(2.1.3)可得到点力偶极子产生的各应变分量为：

$$\varepsilon_{xy} = -\frac{6\varepsilon^*(1+\nu)}{4\pi(1-\nu)} \bar{x}\bar{y} [R_1^{-5} + (3-4\nu)R_2^{-5} - 10z\hat{z}R_2^{-7}] \quad (2.1.21)$$

$$\varepsilon_{zx} = -\frac{6\varepsilon^*(1+\nu)}{4\pi(1-\nu)} \bar{x} [\bar{z}R_1^{-5} + (2z + \hat{z})R_2^{-5} - 10z\hat{z}^2R_2^{-7}] \quad (2.1.22)$$

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\varepsilon^*(1+\nu)}{4\pi(1-\nu)} \left[(R_1^{-3} + (3-4\nu)R_2^{-3} - 6z\hat{z}R_2^{-5}) - 3\bar{x}^2 (R_1^{-5} + (3-4\nu)R_2^{-5} - 10z\hat{z}R_2^{-7}) \right] \quad (2.1.23)$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{\varepsilon^*(1+\nu)}{4\pi(1-\nu)} \left[(R_1^{-3} + (4\nu-1)R_2^{-3} - 3\bar{z}^2R_1^{-5}) - 3(4\nu\hat{z}^2 + \hat{z}(4z + \bar{z}))R_2^{-5} + 30z\hat{z}^3R_2^{-7} \right] \quad (2.1.24)$$

其中

$$\bar{x} = x - x', \quad \bar{y} = y - y', \quad \bar{z} = z - z', \quad \hat{z} = z + z',$$

$$R_1^2 = \bar{x}^2 + \bar{y}^2 + \bar{z}^2, \quad R_2^2 = \bar{x}^2 + \bar{y}^2 + \hat{z}^2,$$

通过对称操作，用 \bar{y} 代替 \bar{x} ，由方程(2.1.22)和(2.1.23)人们容易得到

另外两个应变分量 ε_{xy} 和 ε_{zx} 。将方程(2.1.21)~(2.1.24)代入(2.1.4), 可得点力偶极子产生的应力分量为:

$$\sigma_{xy} = -\frac{3\mu\varepsilon^*(1+\nu)}{2\pi(1-\nu)} \bar{x}\bar{y} [R_1^{-5} + (3-4\nu)R_2^{-5} - 10z\hat{z}R_2^{-7}] \quad (2.1.25)$$

$$\sigma_{xz} = -\frac{3\mu\varepsilon^*(1+\nu)}{2\pi(1-\nu)} \bar{x} [\bar{z}R_1^{-5} + (2z + \hat{z})R_2^{-5} - 10z\hat{z}^2R_2^{-7}] \quad (2.1.26)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} = & \frac{\mu\varepsilon^*(1+\nu)}{2\pi(1-\nu)} [R_1^{-3} + (3-8\nu)R_2^{-3} - 3\bar{x}^2R_1^{-5} \\ & - 3((3-4\nu)\bar{x}^2 + 2z\hat{z} - 4\nu\hat{z}^2)R_2^{-5} + 30z\hat{z}\bar{x}^2R_2^{-7}] \end{aligned} \quad (2.1.27)$$

$$\sigma_{zz} = \frac{\mu\varepsilon^*(1+\nu)}{2\pi(1-\nu)} [R_1^{-3} - R_2^{-3} - 3\bar{z}^2R_1^{-5} - 3\hat{z}(\hat{z} - 6z)R_2^{-5} + 30z\hat{z}^3R_2^{-7}] \quad (2.1.28)$$

类似地, 用 \bar{y} 代替 \bar{x} , 由方程(2.1.26)和(2.1.27)人们容易得到另外两个应力分量 σ_{zy} 和 σ_{yy} 。

第二节 二维薄块产生的表面应变场

夹杂物会在半无限空间的表面 (即 $z=0$ 平面) 产生应变场。应变场 (主要是静水 (hydrostatic) 应变场 ε ($\varepsilon = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$)) 是计算夹杂物与表面吸附原子相互作用能的关键参量, 即它将重要地影响吸附原子在表面的扩散过程, 导致前面所提到的自组装现象。本论文主要讨论夹杂物 (埋藏岛) 对表面生长的影响, 我们主要关心夹杂物在半无限空间表面产生的静水应变场。

在很多情况下, 夹杂物的形状近似于二维薄块, 且由二维薄块的解析式通过数值计算人们容易得到不同形状夹杂物产生的应变场。下面, 基于零维点力偶极子在表面产生的静水应变场, 我们将详细推导二维长方形薄块在表面产生的静水应变场的解析式。

由方程(2.1.23)和(2.1.24), 可得到零维点力偶极子在表面 ($z=0$ 平面) 产生的静水应变场为:

$$G = -\frac{\varepsilon^*(1+\nu)(1-2\nu)}{\pi(1-\nu)} \left(1 - \frac{3z^2}{R^2}\right) / R^3 \quad (2.2.1)$$

其中 $R = \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + z'^2}$ 。

设薄块的长为 l ，宽为 w ，厚度为 h ， h 远小于 l 和 w 。薄块的中心位于点 $(0,0,-d)$ ，如图 2-3 所示。

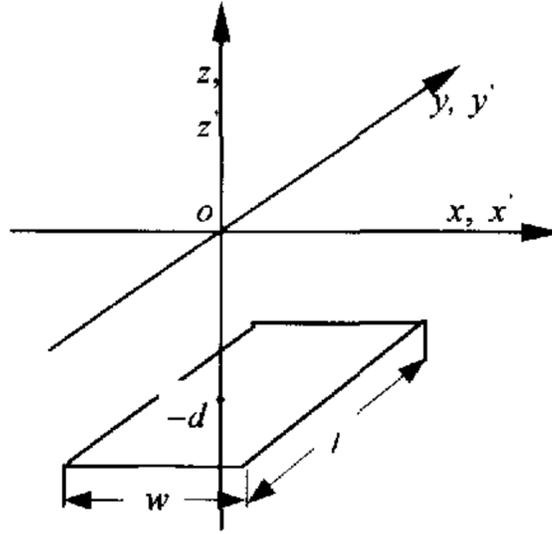


图 2-3: 薄块的示意图

对方程(2.2.1)在区域 $-w/2 < x' < w/2$ ， $-l/2 < y' < l/2$ 进行积分，可得薄块产生的应变场：

$$\varepsilon = A \int_{-l/2}^{l/2} \int_{-w/2}^{w/2} \left(1 - \frac{3d^2}{R^2}\right) / R^3 dx' dy' \quad (2.2.2)$$

其中 $A = -\frac{\varepsilon^*(1+\nu)(1-2\nu)h}{\pi(1-\nu)}$ ， $R = \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + d^2}$ ，下面我们列出推导该表达式积分的详细过程。

$$\begin{aligned} \varepsilon &= A \left(\int_{-l/2}^{l/2} \int_{-w/2}^{w/2} \frac{1}{R^3} dx' dy' - 3 \int_{-l/2}^{l/2} \int_{-w/2}^{w/2} \frac{d^2}{R^5} dx' dy' \right) \\ &= A \int_{-l/2}^{l/2} \int_{-w/2}^{w/2} \frac{1}{R^3} d(x-x')d(y-y') - 3Ad^2 \int_{-l/2}^{l/2} \int_{-w/2}^{w/2} \frac{1}{R^5} d(x-x')d(y-y') \\ &= A \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{(y-y')^2 + d^2} \times \frac{x-x'}{R} \Big|_{-w/2}^{w/2} d(y-y') \\ &\quad - Ad^2 \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{(y-y')^2 + d^2} \times \frac{x-x'}{R^3} \Big|_{-w/2}^{w/2} d(y-y') \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -2Ad^2 \int_{-w/2}^{w/2} \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{(y-y')^2 + d^2} \times \frac{1}{R^3} d(x-x')d(y-y') \\
& = A \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{(y-y')^2 + d^2} \times \frac{x-x'}{R} \Big|_{-w/2}^{w/2} d(y-y') \\
& \quad - Ad^2 \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{(y-y')^2 + d^2} \times \frac{x-x'}{R^3} \Big|_{-w/2}^{w/2} d(y-y') \\
& \quad - 2Ad^2 \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{((y-y')^2 + d^2)^2} \times \frac{x-x'}{R} \Big|_{-w/2}^{w/2} d(y-y') \\
& = \underbrace{(x-w/2)A \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{(y-y')^2 + d^2} \times \frac{1}{R} d(y-y')}_{(1)} \\
& \quad - \underbrace{(x+w/2)A \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{(y-y')^2 + d^2} \times \frac{1}{R} d(y-y')}_{(2)} \\
& \quad - \underbrace{(x-w/2)Ad^2 \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{(y-y')^2 + d^2} \times \frac{1}{R^3} d(y-y')}_{(3)} \\
& \quad + \underbrace{(x+w/2)Ad^2 \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{(y-y')^2 + d^2} \times \frac{1}{R^3} d(y-y')}_{(4)} \\
& \quad - \underbrace{2(x-w/2)Ad^2 \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{((y-y')^2 + d^2)^2} \times \frac{1}{R} d(y-y')}_{(5)} \\
& \quad + \underbrace{2(x+w/2)Ad^2 \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{((y-y')^2 + d^2)^2} \times \frac{1}{R} d(y-y')}_{(6)} \\
& (1) \xrightarrow{\text{令}(x-w/2)^2+d^2=a^2, y-y'=a \tan \theta} = (x-w/2)A \int_{\arctan(\frac{y-l/2}{a})}^{\arctan(\frac{y+l/2}{a})} \frac{1}{a^2 \tan^2 \theta + d^2} \times \frac{1}{\cos \theta} d\theta
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= (x - w/2)A \int_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}}} \frac{1}{(a^2 - d^2) \sin^2 \theta + d^2} d(\sin \theta) \\
&= (x - w/2)A \int_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}}} \frac{1}{(x - w/2)^2 \sin^2 \theta + d^2} d(\sin \theta) \\
&= \frac{A}{d} \arctan\left(\frac{(x - w/2) \sin \theta}{d}\right) \Big|_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}}} \\
&= \frac{A}{d} \arctan\left(\frac{(x - w/2)(y - l/2)}{d((x - w/2)^2 + (y - l/2)^2 + d^2)^{1/2}}\right) \\
&\quad - \frac{A}{d} \arctan\left(\frac{(x - w/2)(y + l/2)}{d((x - w/2)^2 + (y + l/2)^2 + d^2)^{1/2}}\right)
\end{aligned}$$

同理

$$\begin{aligned}
(2) &= -\frac{A}{d} \arctan\left(\frac{(x + w/2)(y - l/2)}{d((x + w/2)^2 + (y - l/2)^2 + d^2)^{1/2}}\right) \\
&\quad + \frac{A}{d} \arctan\left(\frac{(x + w/2)(y + l/2)}{d((x + w/2)^2 + (y + l/2)^2 + d^2)^{1/2}}\right) \\
(3) &\xrightarrow{\text{令 } (x-w/2)^2+d^2=a^2, y-y'=a \tan \theta} = -(x - w/2)Ad^2 \int_{\arctan(\frac{y+l/2}{a})}^{\arctan(\frac{y-l/2}{a})} \frac{1}{a^2 \tan^2 \theta + d^2} \times \frac{1}{a \sec \theta} d\theta \\
&= -\frac{(x - w/2)Ad^2}{a^2} \int_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}}} \frac{1 - \sin^2 \theta}{a^2 \sin^2 \theta + d^2 - d^2 \sin^2 \theta} d(\sin \theta) \\
&= -\frac{(x - w/2)Ad^2}{a^2} \int_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}}} \frac{1}{(x - w/2)^2 \sin^2 \theta + d^2} d(\sin \theta) \\
&\quad + \frac{(x - w/2)Ad^2}{a^2} \int_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}}} \frac{\sin^2 \theta}{(x - w/2)^2 \sin^2 \theta + d^2} d(\sin \theta) \\
&= -\frac{(x - w/2)Ad^2}{a^2} \arctan\left(\frac{(x - w/2) \sin \theta}{d}\right) \times \frac{x - w/2}{(x - w/2)^2 d} \Big|_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}} \\
&\quad + \frac{(x - w/2)Ad^2}{a^2(x - w/2)^2} \int_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}}} d(\sin \theta) \\
&\quad - \frac{(x - w/2)Ad^4}{a^2(x - w/2)^4} \int_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}}} \frac{1}{\sin^2 \theta + d^2 / (x - w/2)^2} d(\sin \theta)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{Ad}{(x-w/2)^2+d^2} \arctan \frac{(x-w/2)(y-l/2)}{d((x-w/2)^2+(y-l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&+ \frac{Ad}{(x-w/2)^2+d^2} \arctan \frac{(x-w/2)(y+l/2)}{d((x-w/2)^2+(y+l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&+ \frac{(y-l/2)d^2}{(x-w/2)((x-w/2)^2+d^2)((x-w/2)^2+(y-l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&- \frac{(y+l/2)d^2}{(x-w/2)((x-w/2)^2+d^2)((x-w/2)^2+(y+l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&- \frac{Ad^3}{(x-w/2)^2((x-w/2)^2+d^2)} \arctan \frac{(x-w/2)(y-l/2)}{d((x-w/2)^2+(y-l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&+ \frac{Ad^3}{(x-w/2)^2((x-w/2)^2+d^2)} \arctan \frac{(x-w/2)(y+l/2)}{d((x-w/2)^2+(y+l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&= -\frac{Ad}{(x-w/2)^2} \arctan \frac{(x-w/2)(y-l/2)}{d((x-w/2)^2+(y-l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&+ \frac{Ad}{(x-w/2)^2} \arctan \frac{(x-w/2)(y+l/2)}{d((x-w/2)^2+(y+l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&+ \frac{(y-l/2)d^2}{(x-w/2)((x-w/2)^2+d^2)((x-w/2)^2+(y-l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&- \frac{(y+l/2)d^2}{(x-w/2)((x-w/2)^2+d^2)((x-w/2)^2+(y+l/2)^2+d^2)^{1/2}}
\end{aligned}$$

同理

$$\begin{aligned}
(4) &= \frac{Ad}{(x+w/2)^2} \arctan \frac{(x+w/2)(y-l/2)}{d((x+w/2)^2+(y-l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&- \frac{Ad}{(x+w/2)^2} \arctan \frac{(x+w/2)(y+l/2)}{d((x+w/2)^2+(y+l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&- \frac{(y-l/2)d^2}{(x+w/2)((x+w/2)^2+d^2)((x+w/2)^2+(y-l/2)^2+d^2)^{1/2}} \\
&+ \frac{(y+l/2)d^2}{(x+w/2)((x+w/2)^2+d^2)((x+w/2)^2+(y+l/2)^2+d^2)^{1/2}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(5) \xrightarrow{\text{令 } (x-w/2)^2+d^2=a^2, y-y'=a \tan \theta} &= 2(x-w/2)Ad^2 \int_{\arctan(\frac{y+l/2}{a})}^{\arctan(\frac{y-l/2}{a})} \frac{1}{(a^2 \tan^2 \theta + d^2)^2 \cos \theta} d\theta \\
&= \frac{2((x-w/2)^2 + d^2)Ad^2}{x-w/2} \int_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}}} \frac{1}{(x-w/2)^2 \sin^2 \theta + d^2} d(\sin \theta) \\
&+ \frac{2Ad^2}{x-w/2} \int_{\sqrt{(y+l/2)/(a^2+(y+l/2)^2)^{1/2}}}^{\sqrt{(y-l/2)/(a^2+(y-l/2)^2)^{1/2}}} \frac{1}{((x-w/2)^2 \sin^2 \theta + d^2)^2} d(\sin \theta) \\
&= \frac{A(y-l/2)((x-w/2)^2 + (y-l/2)^2 + d^2)^{1/2}}{(x-w/2)((y-l/2)^2 + d^2)} \\
&+ \frac{A(y+l/2)((x-w/2)^2 + (y+l/2)^2 + d^2)^{1/2}}{(x-w/2)((y+l/2)^2 + d^2)} \\
&- A \frac{(x-w/2)^2 + d^2}{d(x-w/2)^2} \arctan \frac{(x-w/2)(y-l/2)}{d((x-w/2)^2 + (y-l/2)^2 + d^2)^{1/2}} \\
&+ A \frac{(x-w/2)^2 + d^2}{d(x-w/2)^2} \arctan \frac{(x-w/2)(y+l/2)}{d((x-w/2)^2 + (y+l/2)^2 + d^2)^{1/2}} \\
&+ \frac{2Ad}{(x-w/2)^2} \arctan \frac{(x-w/2)(y-l/2)}{d((x-w/2)^2 + (y-l/2)^2 + d^2)^{1/2}} \\
&- \frac{2Ad}{(x-w/2)^2} \arctan \frac{(x-w/2)(y+l/2)}{d((x-w/2)^2 + (y+l/2)^2 + d^2)^{1/2}}
\end{aligned}$$

同理

$$\begin{aligned}
(6) &= \frac{A(y-l/2)((x+w/2)^2 + (y-l/2)^2 + d^2)^{1/2}}{(x+w/2)((y-l/2)^2 + d^2)} \\
&- \frac{A(y+l/2)((x+w/2)^2 + (y+l/2)^2 + d^2)^{1/2}}{(x+w/2)((y+l/2)^2 + d^2)} \\
&+ A \frac{(x+w/2)^2 + d^2}{d(x+w/2)^2} \arctan \frac{(x+w/2)(y-l/2)}{d((x+w/2)^2 + (y-l/2)^2 + d^2)^{1/2}} \\
&- A \frac{(x+w/2)^2 + d^2}{d(x+w/2)^2} \arctan \frac{(x+w/2)(y+l/2)}{d((x+w/2)^2 + (y+l/2)^2 + d^2)^{1/2}} \\
&- \frac{2Ad}{(x+w/2)^2} \arctan \frac{(x+w/2)(y-l/2)}{d((x+w/2)^2 + (y-l/2)^2 + d^2)^{1/2}}
\end{aligned}$$

$$+ \frac{2Ad}{(x+w/2)^2} \arctan \frac{(x+w/2)(y+l/2)}{d((x+w/2)^2 + (y+l/2)^2 + d^2)^{1/2}}$$

$\varepsilon = (1) + (2) + (3) + (4) + (5) + (6)$, 化简可得:

$$\begin{aligned} \varepsilon = & -\frac{A(x-w/2)(y-l/2)((x-w/2)^2 + (y-l/2)^2 + 2d^2)}{((x-w/2)^2 + d^2)((y-l/2)^2 + d^2)((x-w/2)^2 + (y-l/2)^2 + d^2)^{1/2}} \\ & + \frac{A(x+w/2)(y-l/2)((x+w/2)^2 + (y-l/2)^2 + 2d^2)}{((x+w/2)^2 + d^2)((y-l/2)^2 + d^2)((x+w/2)^2 + (y-l/2)^2 + d^2)^{1/2}} \\ & + \frac{A(x-w/2)(y+l/2)((x-w/2)^2 + (y+l/2)^2 + 2d^2)}{((x-w/2)^2 + d^2)((y+l/2)^2 + d^2)((x-w/2)^2 + (y+l/2)^2 + d^2)^{1/2}} \\ & - \frac{A(x+w/2)(y+l/2)((x+w/2)^2 + (y+l/2)^2 + 2d^2)}{((x+w/2)^2 + d^2)((y+l/2)^2 + d^2)((x+w/2)^2 + (y+l/2)^2 + d^2)^{1/2}} \\ = & -A \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 (-1)^{i+j} \frac{x_i y_j (x_i^2 + y_j^2 + 2d^2)}{(x_i^2 + d^2)(y_j^2 + d^2)(x_i^2 + y_j^2 + d^2)^{1/2}} \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

其中 $x_i = x \pm w/2$, ($i=1,2$), $y_j = y \pm w/2$, ($j=1,2$)。

第三节 长方体产生的表面应变场

基于点夹杂物产生的表面应变场,我们将进一步推导半无限空间中埋藏的长方体在表面产生的静水应变场的解析式。

我们假设埋藏长方体的长宽高分别为 w , l , h 。长方体的底面与表面 ($z=0$ 平面) 的距离为 H 。

求长方体在表面 ($z=0$ 平面) 产生的静水应变场即对方程(2.2.1) 进行积分:

$$\varepsilon = A \int_{H-h}^H \int_{l/2}^{l/2} \int_{w/2}^{w/2} \left(1 - \frac{3z'^2}{R^2}\right) / R^3 dx' dy' dz' \quad (2.3.1)$$

其中 $A = -\frac{\varepsilon^*(1+\nu)(1-2\nu)}{\pi(1-\nu)}$, $R = \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + z'^2}$, 下面我们列

出推导该表达式积分的详细过程。

$$\varepsilon = A \int_{H-h}^H \int_{l/2}^{l/2} \int_{w/2}^{w/2} \frac{\partial}{\partial z'} \left(\frac{z'}{R^3}\right) dx' dy' dz'$$

$$\begin{aligned}
& \xrightarrow{\text{由高斯公式}} = AH \int_{-l/2}^{l/2} \int_{-w/2}^{w/2} \frac{1}{R^3} dx' dy' - A(H-h) \int_{-l/2}^{l/2} \int_{-w/2}^{w/2} \frac{1}{R^3} dx' dy' \\
& = A \arctan\left(\frac{(x-w/2)(y-l/2)}{H((x-w/2)^2 + (y-l/2)^2 + H^2)^{1/2}}\right) \\
& \quad - A \arctan\left(\frac{(x-w/2)(y+l/2)}{H((x-w/2)^2 + (y+l/2)^2 + d^2)^{1/2}}\right) \\
& \quad - A \arctan\left(\frac{(x+w/2)(y-l/2)}{H((x+w/2)^2 + (y-l/2)^2 + H^2)^{1/2}}\right) \\
& \quad + A \arctan\left(\frac{(x+w/2)(y+l/2)}{H((x+w/2)^2 + (y+l/2)^2 + H^2)^{1/2}}\right) \\
& \quad - A \arctan\left(\frac{(x-w/2)(y-l/2)}{(H-h)((x-w/2)^2 + (y-l/2)^2 + (H-h)^2)^{1/2}}\right) \\
& \quad + A \arctan\left(\frac{(x-w/2)(y+l/2)}{(H-h)((x-w/2)^2 + (y+l/2)^2 + (H-h)^2)^{1/2}}\right) \\
& \quad + A \arctan\left(\frac{(x+w/2)(y-l/2)}{(H-h)((x+w/2)^2 + (y-l/2)^2 + (H-h)^2)^{1/2}}\right) \\
& \quad - A \arctan\left(\frac{(x+w/2)(y+l/2)}{(H-h)((x+w/2)^2 + (y+l/2)^2 + (H-h)^2)^{1/2}}\right) \\
& = -A \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 (-1)^{i+j+k} \times \arctan\left(\frac{x_i y_j}{z_k \sqrt{x_i^2 + y_j^2 + z_k^2}}\right) \quad (2.3.2)
\end{aligned}$$

其中 $x_i = x \pm w/2$, ($i=1,2$), $y_j = y \pm w/2$, ($j=1,2$), $z_1 = H$, $z_2 = H-h$ 。

第四节 本章小结

基于连续介质理论的格林函数方法, 我们详细地介绍了埋藏的点力偶极子在半无限空间中产生的位移场、应变场及应力场, 并进一步获得了半无限空间中埋藏的长方形薄块及长方体在表面产生的静水应变场。

第三章 表面应变场对埋藏岛尺寸形状的依赖特性

埋藏岛（量子点）会在系统表面产生应变场，应变场的分布依赖于埋藏岛到表面的距离（即覆盖该岛的隔离层的厚度）和埋藏岛的尺寸。在连续介质理论中，当把埋藏岛处理成零维的点力偶极子时，应变与隔离层的厚度成三次方的倒数关系，与岛的体积成正比。用分子动力学方法，Daruka 等人^[21]发现金字塔形埋藏岛产生的表面应变场也与隔离层的厚度成三次方的倒数关系，与岛的体积成正比。人们可以近似地把它看成点力偶极子。而同样是用分子动力学方法，Makeev 等人^[22]发现金字塔形埋藏岛产生的表面应变场与隔离层的厚度成反比，与岛的表面积成正比，埋藏岛的形状对表面应变场有着非常重要的影响。

使用连续介质的格林函数方法，钟建新等^[24]成功地回答了这一看似矛盾的结果，并进一步证实了埋藏岛形状对应变场的重要影响。他们发现金字塔形埋藏岛产生的表面应变场与隔离层厚度的关系随着隔离层厚度的增加从非三次方的倒数关系转变成三次方的倒数关系，并且这非三次方的大小依赖于金字塔形岛侧面的斜率，斜率越大就越接近三次方的倒数关系，斜率越小就越偏离三次方的倒数关系。同时，当金字塔形岛侧面的斜率较大时，应变与体积成正比；当它的斜率较小时，应变与表面积成正比。

在典型的生长温度（高于 500℃），最近的研究^[18,27,28]显示，在表面岛被覆盖的过程中，表面岛将与周围材料形成互扩散，它的底部面积增大、高度减小，形成较平整的埋藏岛（高度与底部宽度之比一般小于 0.1）。我们认为，在这种情况下若把埋藏岛处理成薄块也许更符合实际情况。基于上一章得到的长方形薄块在隔离层表面产生的静水应变场的解析式，本章我们将详细分析正方形薄块引起的表面应变场分布，同时对该表达式在高度方向进行数值求和，进一步分析金字塔形岛引起的表面应变场分布（复述导师的工作）。

第一节 薄块引起的表面应变场分布

前面我们已得到半无限空间中埋藏的长方形薄块在表面产生的静水应变场的解析式，由方程(2.2.3)，可得宽度为 w 的正方形薄块在厚度为 d 的隔离层表面产生的静水应变场为：

$$\varepsilon = \frac{Ch}{w} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 (-1)^{i+j} \frac{x_i y_j (x_i^2 + y_j^2 + 2(d/w)^2)}{(x_i^2 + (d/w)^2)(y_j^2 + (d/w)^2)(x_i^2 + y_j^2 + (d/w)^2)^{1/2}} \quad (3.1.1)$$

其中 $C = \varepsilon^*(1+\nu)(1-2\nu)/\pi(1-\nu)$, $x_i = x/w \pm 0.5$, ($i=1,2$), $y_j = y/w \pm 0.5$, ($j=1,2$)。 h 是薄块的厚度（它远小于宽度 w ）， C 中的 ν 是泊松比， ε^* 是晶格失配常数，在 Ge/Si 系统中它的值是 4.2%，InAs/GaAs 系统中它的值是 7.2%。从方程(3.1.1)可知应变 ε 的分布特性仅依赖于空间尺寸与薄块宽度的相对大小，所以我们的分析都是考虑相对尺寸变化对 ε 的影响。由于 ν 和 ε^* 的选取不影响表面应变场的分布特性，在我们的讨论中没有选取确定的值。

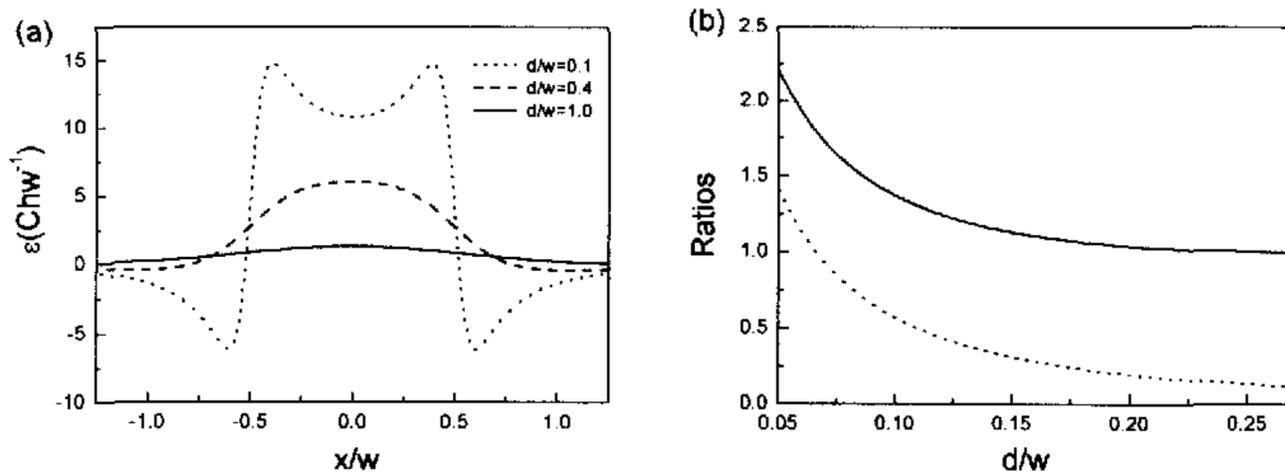


图 3-1: (a) $y=0$ 情况下，不同 d/w 时表面静水应变随 x/w 的变化， $d/w=0.1$ （点线）， 0.4 （虚线）， 1.0 （实线）。(b) 拉应变极值偏离薄块中心正上方的情况下，拉应变极值与薄块中心正上方应变的比值（实线）和压应变极值与薄块中心正上方应变的比值（虚线）随 d/w 的变化。

图 3-1(a)显示 $y=0$ 情况下不同 d/w 时表面应变随 x/w 的变化。点线，虚线和实线分别对应 $d/w=0.1, 0.4, 1.0$ 。我们能清楚地看到埋藏薄块在它的上方产生了拉应变，且应变的大小随 d/w 的增大而减

小。当 d/w 较大时,埋藏薄块在隔离层表面产生的应变很小,对表面吸附原子的扩散影响很小,不足以引起多层生长中的关联特性。当 d/w 较小时,埋藏岛将在它的上方产生较大的应变场。特别值得注意的是,与先前人们对点力偶极子、球形岛及金字塔形岛的研究对比,得到了不同的结果,当 d/w 很小时如 $d/w=0.1$,拉应变的极值不再位于埋藏岛中心的正上方。同时,我们还发现薄块上方拉应变的周围出现一个较大的压应变,压应变的大小与中心处的拉应变的大小可相比拟。拉应变区域是形核的有利位置,在应变场的驱动下,表面吸附原子将朝拉应变区域运动。由上分析,在多层生长中埋藏岛将会出现垂直关联的特性,很好地说明了先前的实验观测^[6-10]。另一方面,压应变区域是形核的不利位置,因此表面吸附原子很难在压应变较大的区域聚集,而且在温度较低的情况下,表面原子很难穿越这一壁垒,这意味着在多层生长中,当生长温度较低时,岛的尺寸是很难增大的,这与先前 InAs/GaAs 系统的实验观测相一致^[10]。我们还注意到,在某些隔离层厚度很小的多层生长实验中,表面岛相对于前面一层埋藏岛依然会增大^[18,72],与刚才的理论分析不符,出现这种现象主要原因是:岛在被覆盖的过程中存在互扩散致使它的尺寸增大,新生长的表面岛尺寸也许小于埋藏岛尺寸,只不过当新生长的表面岛被新沉积的隔离层覆盖时互扩散又使它的尺寸增大了,这样在电子显微镜的图片中显示出埋藏岛的尺寸逐渐增大。利用隔离层很小时埋藏岛将在它周围产生较大压应变的特性,合理地控制生长条件,可以获得密度大、尺寸小的量子点阵列,最近的实验观测就已证实我们的理论预言^[72,73]。我们的计算也很好解释了为什么第一层埋藏岛上面生长的表面岛不再是金字塔形而是较平整的梯形岛的实验现象^[18]。

我们的数值计算显示当 $d/w < 0.27$ 时,拉应变的极值开始偏离薄块中心的正上方。为了进一步理解 d/w 很小时应变场的特性,图 3-1(b)显示了 $d/w < 0.27$ 情况下,拉应变极值和压应变极值与薄块中心正上方应变的比值随 d/w 变化的函数。由图可知随着 d/w 的减小,拉应变极值和压应变极值与薄块中心正上方应变的比值迅速增大。

当 $d/w = 0.05$ 时, 拉应变极值和压应变极值与薄块中心正上方应变的比值分别接近 2.2 和 1.4。

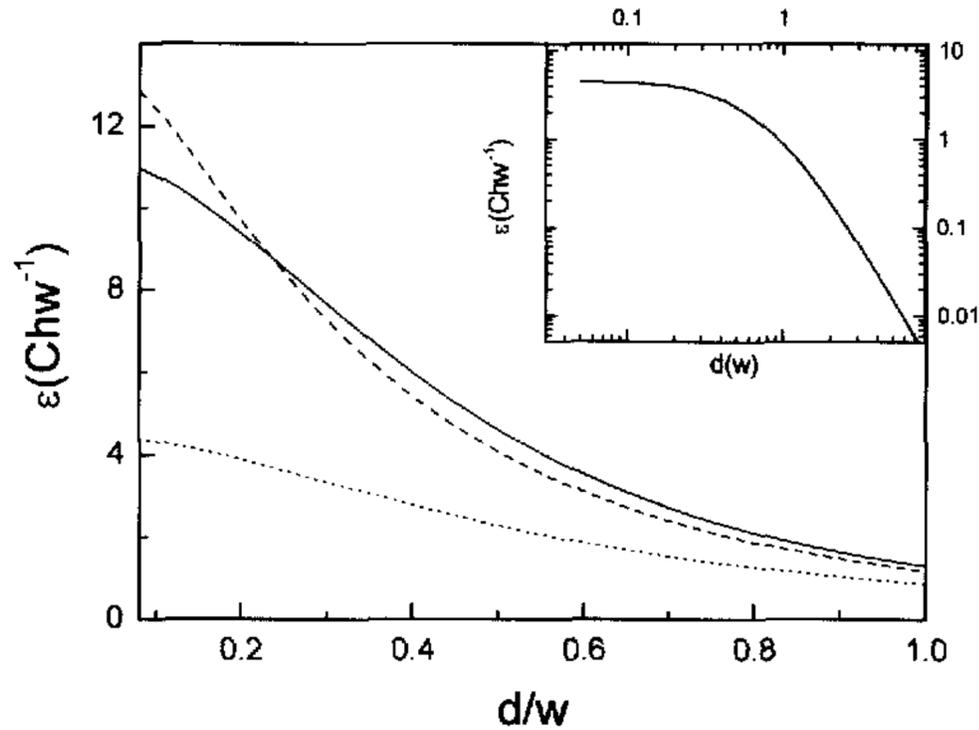


图 3-2: 不同位置表面应变随 d/w 变化的函数, 实线 ($x=0, y=0$), 虚线 ($x/w=0.25, y=0$), 点线 ($x/w=0.5, y=0$)。插图是点 ($x=0, y=0$) 处的应变随 d/w 变化的对数关系。

图 3-2 显示点 ($x=0, y=0$), ($x/w=0.25, y=0$), ($x/w=0.5, y=0$) 处的表面应变随 d/w 变化的函数关系。在 d/w 较小的区间里, 应变可近似认为随 d/w 的增大而线性下降。点 ($x/w=0.25, y=0$) 处的应变比点 ($x=0, y=0$) 处的应变衰减的更快。为了方便与其它形状埋藏岛产生的应变场相比较, 插图进一步作出了点 ($x=0, y=0$) 处的应变随 d/w 变化的对数曲线。从图中可知, 它既不同于点力偶极子对隔离层厚度负三次方的依赖关系, 也不同于金字塔形岛对隔离层厚度负一次方的依赖关系, 它对隔离层厚度的依赖是逐渐变化的, 我们很难拟合该曲线通过一个具体的表达式。当 $d/w > 2.0$ 时, 它对 d/w 的依赖呈负三次方的关系, 即对隔离层厚度呈负三次方的依赖关系, 在这种情况下我们可以把它当作点力偶极子处理。当然一般当

$d/w > 2.0$ 时, 埋藏岛产生的应变场很小, 几乎吸附原子的扩散不产生影响。另外, 从图中我们也可以看出薄块产生的应变场衰减的很慢, 例如, $d/w = 0.4$ 时薄块在 $(x=0, y=0)$ 处产生的应变接近于 $d/w = 0.2$ 时它在该处产生的应变的 $2/3$; 当 d/w 增加到 0.8 , 它仍然超过了 $d/w = 0.2$ 时应变的 $1/5$ 。应变衰减很慢意味着隔离层很薄的多层结构中, 不仅表面下的第一层埋藏岛, 而且第二层, 甚至第三层、第四层都对表面应变场的调制有很大的影响, 这非常类似于有限元方法得到的结果^[18]。

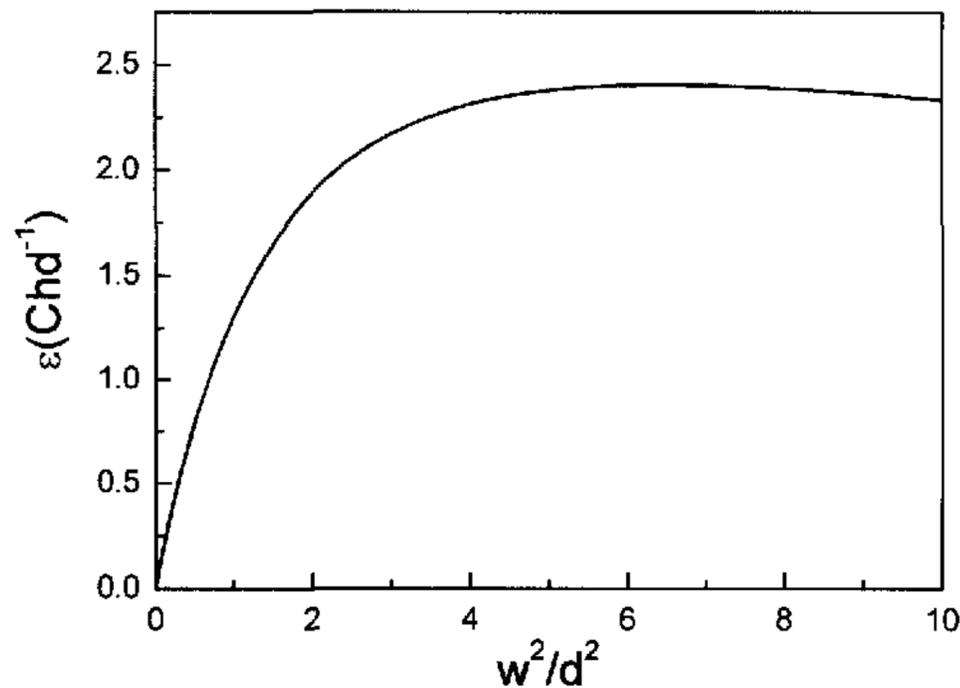


图 3-3: 点 $(x=0, y=0)$ 处的表面应变随体积变化的函数。

以往的研究显示应变与岛的体积成比例^[21-24]。而我们对薄块的研究却显示出不同的行为。图 3-3 显示点 $(x=0, y=0)$ 处的表面应变随薄块体积 (即 w^2/d^2) 变化的函数。当体积很小, 即 w 远小于 d 时, 类似于点力偶和球形岛, 应变随体积的增大而线性增加。随着体积的增大, 应变逐渐偏离线性依赖关系, 应变的增加变得越来越慢。

对方程 (3.1.1) 求微分, 我们发现, 当 $w = \sqrt{2(1+\sqrt{5})}d$, 即当 $w^2/d^2 = 2(1+\sqrt{5})$ 时, 应变达到极值, 超过这个极值, 应变随体积的

增大反而会下降，完全不同于以前的理论分析。事实上，若仔细思考一下，我们也不难理解这种特性，在点力偶极子产生的表面应变场中，位于该点力偶极子正上方位置的值最大，因此，薄块中心位置的点力偶极子在 $(x=0, y=0)$ 处产生的应变场最大，其它位置次之，且点力偶极子离薄块中心越远它在该点产生应变场就越小，当 w 超过 $\sqrt{2(1+\sqrt{5})}d$ 时，增大的体积反而会在该点处产生压应变，使拉应变逐渐变小。此外，我们也计算了表面其它位置应变随薄块体积的变化，当体积超过某一值时，同样会出现应变随体积增大而减小的情况，只不过不同的位置对应薄块体积的临界值不一样。以上结果进一步说明埋藏岛的大小、形状对表面应变场的调制有关键性的作用。

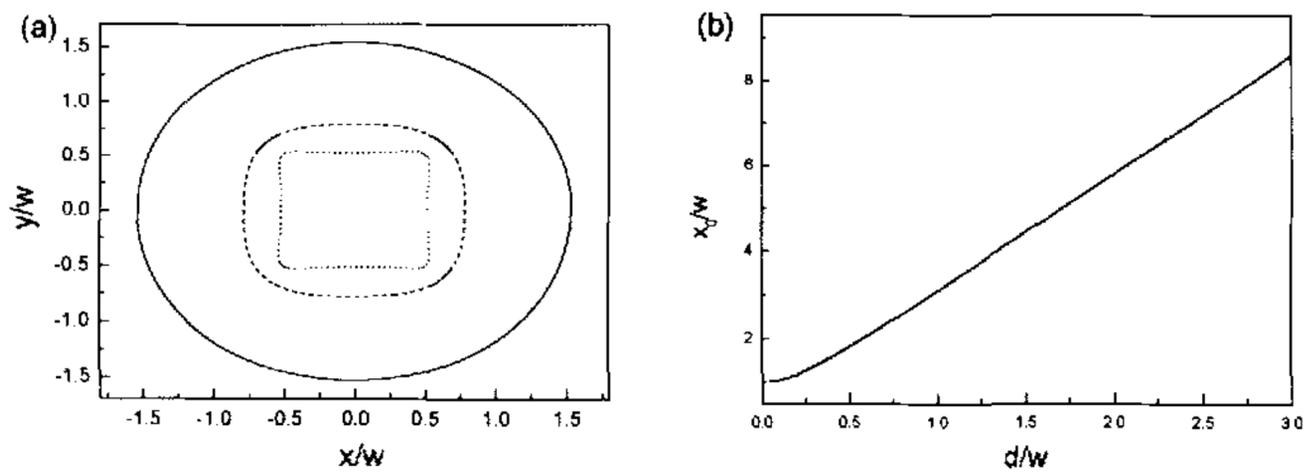


图 3-4: (a)不同 d/w 时薄块在隔离层表面产生的拉应变区域，点线、虚线和实线围成的区域分别对应 $d/w=0.1,0.4,1.0$ ；(b)拉应变区域水平方向的宽度 x_0 与薄块 w 的比值随 d/w 变化的函数。

从图 3-1(a)中，我们看到埋藏薄块产生了一个不均匀的表面应变场：薄块的上方区域是拉应变，在这个区域的周围是压应变。拉应变区域的大小是控制表面岛尺寸的一个重要参数^[33,71]。它的特性同样是由隔离层厚度、埋藏岛的体积及形状决定。图 3-4(a)显示不同 d/w 时，薄块在隔离层表面产生的拉应变区域。点线、虚线和实线分别对应 $d/w=0.1,0.4,1.0$ 。当 d/w 很小时，拉应变区域和埋藏薄块

具有相近的面积和相似的对称性。随着 d/w 的增大,拉应变区域的面积逐渐增大,而且形状也逐渐向圆形过渡。我们还计算了埋藏的薄块阵列产生的应变场,发现只要薄块的密度不是很大,应变场的分布特性变化很小。图 3-2(b)显示拉应变区域沿水平方向的尺寸 x_0 与薄块宽度 w 的比值随 d/w 变化的函数。除了在 d/w 很小的情况下, x_0/w 近似与 d/w 成线性关系,即拉应变区域近似与 d/w 成二次方的关系。当 d/w 无限小,即 w/d 无限大时, x_0/w 接近 1。

我们详细分析了正方形薄块引起的表面应变场分布。研究显示埋藏岛会在它的上方产生拉应变。而且,当隔离层厚度很小,即隔离层厚度与薄块宽度的比值很小时,拉应变的极值不再位于薄块中心的正上方,并有一个大小和中心位置处应变可相比拟的压应变出现在拉应变区域的周围。这完全不同于点力偶极子和金字塔形岛,薄块产生的应变场对隔离层厚度的依赖既不是负三次方的关系也不是负一点五次方的关系,我们很难用一个不变的指数来拟合它的衰变曲线。体积对应变的影响也显示出不同的特性,随着体积的增加,当岛的体积即薄块的宽度超过某一极值时,它所产生的应变非但不会增加反而会减小。当隔离层厚度很小时,正方形薄块将在隔离层表面产生一个和它具有相同对称性和大小相近的拉应变区域。随隔离层厚度的增大,拉应变区域的面积呈二次方增长,且它的形状由正方形逐渐向圆形过渡。

第二节 金字塔形岛引起的表面应变场分布

第一章我们介绍了表面岛一般为金字塔形或圆屋顶形,在生长温度很低的情况下,表面岛在被覆盖的过程中很难发生互扩散,形状基本保持不变^[27]。因此人们先前的计算模拟中,多数把埋藏岛处理成金字塔形岛。上一节中我们计算了薄块在隔离层表面产生的应变场,若对它在高度方向进行数值求和,我们就可以得到埋藏金字塔形岛产生的表面应变场。本节将复述导师钟建新教授^[24]的研究工作,他首先比较了连续介质理论中格林函数方法得到的结果与原子

尺度计算模拟得到的结果，成功地证明了连续介质理论格林函数方法在埋藏量子点系统中的有效性，接着阐述了应变场对金字塔形埋藏岛几何形状的依赖特性，回答了先前不同研究小组矛盾的研究结果。

先前大多数课题组的理论研究都是讨论 Ge/Si 系统，因为它最方便计算，其它类似系统和它具有相同的特性。本节中，为了简单和方便比较，依然讨论 Ge/Si 系统。

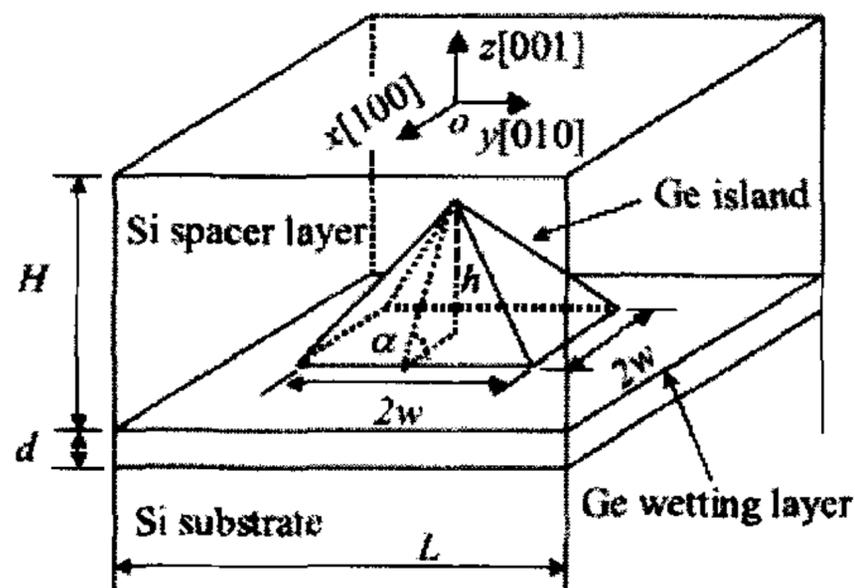


图 3-5: 系统的示意图。Si 基底上一个具有 Ge 浸润层的金字塔形 Ge 岛被 Si 隔离层覆盖。

图 3-5 显示了位于 Si (001) 基底上浸润层(wetting layer)厚度为 d 的金字塔形 Ge 岛被厚度为 H 的 Si 隔离层所覆盖的示意图。岛的底部是宽度为 $2w$ 的正方形，分别沿 $[100]$ 和 $[010]$ 方向。岛的高度 $h = w \tan \alpha$ ， α 是岛侧面的倾斜角。一般浸润层的厚度都非常小，比如在 Ge/Si 系统中大约为 3 个 ML (单原子层)。它对隔离层表面应变场的贡献为一很小的常数，因此在本节的讨论中将忽略了浸润层的影响。系统的周期取为 L ，当 $L \rightarrow \infty$ 时，系统仅由一个埋藏岛组成。

由方程(2.2.3)，可得距离隔离层表面为 H 宽度为 $2w$ 的正方形薄产生的表面静水应变场为：

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon^*(1+\nu)(1-2\nu)h}{\pi(1-\nu)} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 (-1)^{i+j} \frac{x_i y_j (x_i^2 + y_j^2 + 2H^2)}{(x_i^2 + H^2)(y_j^2 + H^2)(x_i^2 + y_j^2 + H^2)^{1/2}} \quad (3.2.1)$$

其中 $x_i = x \pm w$, ($i=1,2$), $y_j = y \pm w$, ($j=1,2$), ν 是隔离层材料的泊松比, $\varepsilon^* = (a_i - a_s)/a_i$ 是晶格失配常数, 这里 a_i 和 a_s 分别是夹杂物和隔离层材料的晶格常数。由弹性理论可知, 静水应力与静水应变的关系是 $\sigma = (E/(1-2\nu))\varepsilon$, 其中 E 是杨氏模量。我们取薄块厚度 h 为一个单原子层, 然后对它在高度方向进行数值求和, 就可以得到金字塔形岛产生的表面应变场。在 Ge/Si 系统的计算中, 选取 $a_i = a_{Ge} = 5.656 \text{ \AA}$, $a_s = a_{Si} = 5.431 \text{ \AA}$ 。和参考文献 21 一样, 选取 $\nu = 0.218$ 。

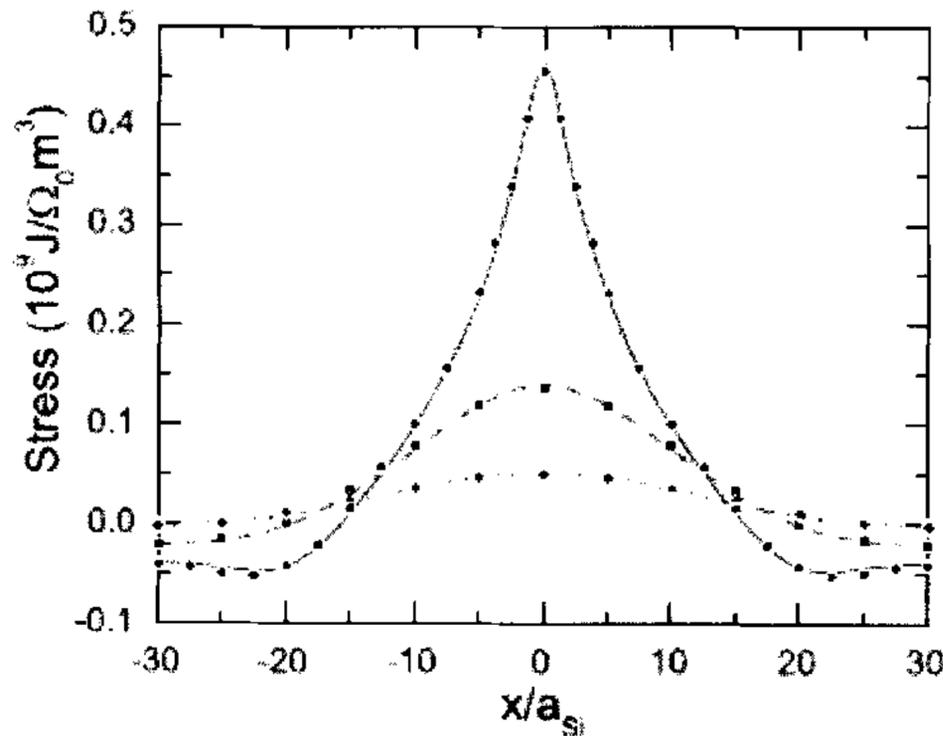


图 3-6: $y = z = 0$ 时宽度 $w = 20a_{Si}$, 高度 $h = 17 \text{ ML}$, 周期 $L = 60a_{Si}$ 的金字塔形 Ge 岛阵列产生的表面应力 σ 随 x 变化的函数。符号是参考文献 21 中原子尺度模拟得到的结果。圆圈、正方形和菱形分别对应 $H = 21, 49, 81 \text{ ML}$ 。线条是连续介质理论格林函数方法得到的结果。

在图 3-6 中, 比较了周期性埋藏 Ge 岛阵列(周期 $L = 60a_{Si}$)产生的应变场与原子尺度模拟得到的结果。金字塔形 Ge 岛的侧面为 $\{105\}$ 晶面, $w = 20a_{Si}$, $h = 17 \text{ ML}$ 。图 3-6 中的符号是原子尺度的模拟结果^[22]

减去隔离层表面重构所引起的常数项 p_d 的贡献后得到的值。对于 $H = 21, 19, 81$ ML, 分别取 $E = 8.404 \times 10^9 J / \Omega_0 m^3, 10.152 \times 10^9 J / \Omega_0 m^3, 10.152 \times 10^9 J / \Omega_0 m^3$ 。由图可知, 它极好地拟合了原子尺度的模拟结果。这里 $\Omega_0 = \Omega / a_{Si}^3$ 是无量纲的平均原子体积。常数项 p_d 是与应力相关的表面二聚。图 4-6 的拟合要求 $p_d = 0.754(10^9 J / \Omega_0 m^3)$, 它和原子尺度模拟所得到的值 $p_d = 0.747(10^9 J / \Omega_0 m^3)$ 非常接近。值得注意的是, 当隔离层厚度为 21 ML 时采用了不同的杨氏模量, 这可能是由于当 Si 隔离层的表面接近埋藏 Ge 岛时, Si 材料的力学性能发生了轻微的改变导致的。另外, 我们也计算了单个埋藏 Ge 岛 ($L \rightarrow \infty$) 产生的应力场, 发现 $L = 60a_{Si}$ 和 $L \rightarrow \infty$ 两个系统在埋藏岛上方产生的表面应力场的差别非常小。即就是说, 应变、应力场的衰变非常快, 邻近埋藏岛的作用可以忽略。下面的分析是单个埋藏 Ge 岛产生的表面应变场。

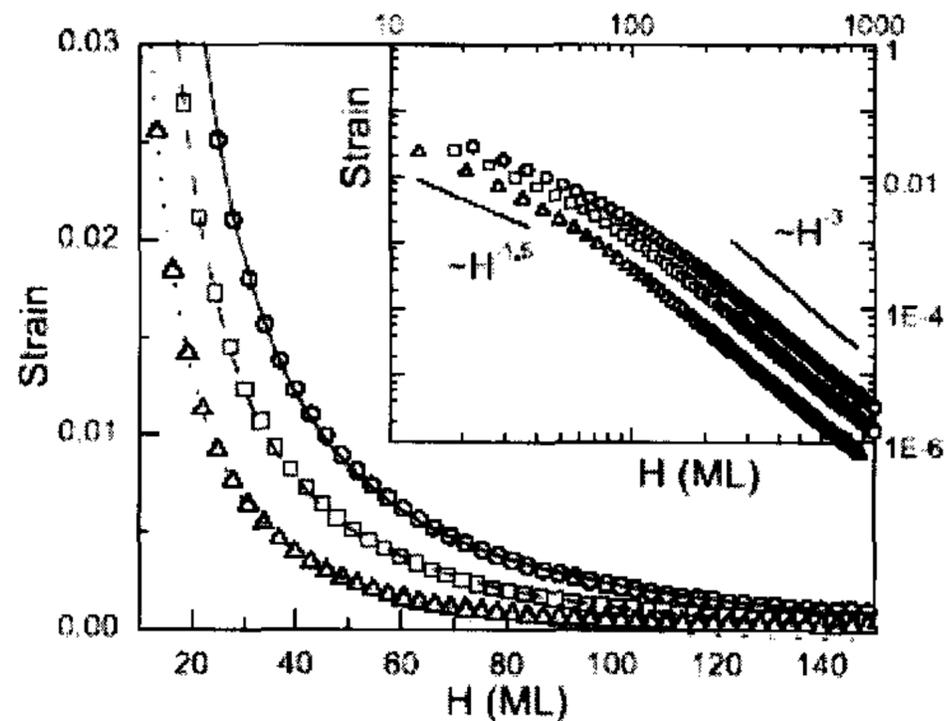


图 3-7: $x = y = 0$ 处的应变 ε 随隔离层厚度 H 变化的函数。圆圈、正方形和三角形分别对应岛的尺寸 $(w, h) = (20a_{Si}, 17ML), (15a_{Si}, 13ML)$ 和 $(10a_{Si}, 9ML)$ 。曲线对应隔离层厚度 H 较小时的拟合结果, 拟合曲线的表达式为 $\varepsilon = a_0 + a_1 / H^{1.5}$, 相应的参数分别为 $(a_0, a_1) = (-1.26 \times 10^{-3}, 1.29), (-9.20 \times 10^{-4}, 2.06), (-1.04 \times 10^{-3}, 3.30)$ 。插图显示随 H 增加应变场衰变从 $\gamma = 1.5$ 转变成 $\gamma = 3$ 。

图 3-7 显示 $x = y = 0$ 处的应变随隔离层厚度变化的函数。符号是运用格林函数方法所得到的关于三个不同尺寸晶面为 $\{105\}$ 面金字塔形 Ge 岛的结果。插图则是应变与隔离层厚度的对数关系。圆圈、正方形和三角形分别对应 Ge 岛尺寸 $(w, h) = (20a_{Si}, 17ML)$, $(15a_{Si}, 13ML)$ 和 $(10a_{Si}, 9ML)$ 。曲线是隔离层厚度较小时的拟合结果。使用拟合表达式 $\varepsilon = a_0 + a_1 / H^\gamma$, 取 $\gamma = 1.50$, 相应的参数分别为 $(a_0, a_1) = (-1.26 \times 10^{-3}, 1.29), (-9.20 \times 10^{-4}, 2.06), (-1.04 \times 10^{-3}, 3.30)$ 。对于同样的 Ge 岛, 先前原子尺度的模拟计算显示 $\gamma \approx 1$ ^[22]。在他们的拟合中, 所取的数据点较少。基于大量的数据点, 计算显示 $\gamma = 1.50$ 的曲线能更好地拟合这些数据点。而且, 格林函数方法允许处理更大的隔离层厚度。然而, 由于受限于计算机的处理能力原子尺度模拟是不可能的。插图显示随着隔离层厚度的增加, 应变的衰变从 $\gamma = 1.5$ 转变成 $\gamma = 3$ 。

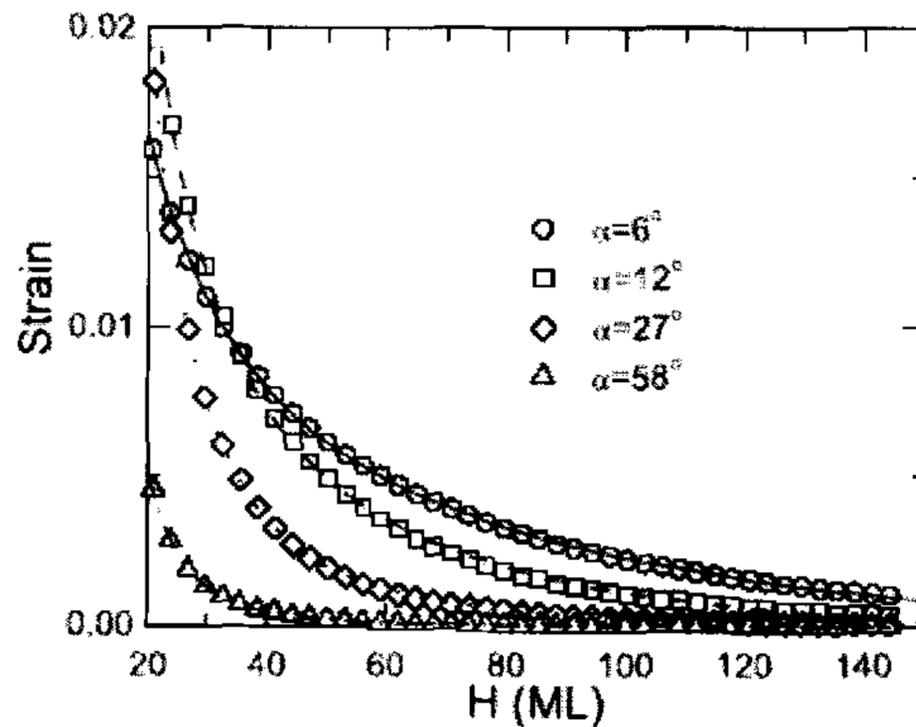


图 3-8: $x = y = 0$ 处的应变 ε 随隔离层厚度 H 变化的函数。圆圈、正方形、菱形和三角形分别对应岛的倾斜角 $\alpha = 6^\circ, 12^\circ, 27^\circ, 58^\circ$ 。线条是数据的拟合结果, 拟合表达式 $\varepsilon = a_0 + a_1 / H^\gamma$ 中的应参数分别为 $(a_0, a_1, \gamma) = (-2.48 \times 10^{-3}, 0.25, 0.86), (-9.20 \times 10^{-4}, 2.06, 1.50), (-1.10 \times 10^{-4}, 33.02, 2.47)$ 。

这里我们发现指数 γ 是岛斜率的函数,且岛的斜率越大指数 γ 越大。图 3-8 显示四个不同斜率金字塔形岛引起的应变场的衰变行为。圆圈、正方形、菱形和三角形分别对应 Ge 岛尺寸 $(w,h) = (30a_{\text{Si}}, 13ML), (15a_{\text{Si}}, 13ML), (6.5a_{\text{Si}}, 13ML), (2a_{\text{Si}}, 13ML)$, 即岛的倾斜角分别为 $\alpha = 6^\circ, 12^\circ, 27^\circ, 58^\circ$ 。使用拟合表达式 $\varepsilon = a_0 + a_1/H^\gamma$, 分别取 $(a_0, a_1, \gamma) = (-2.48 \times 10^{-3}, 0.25, 0.86), (-9.20 \times 10^{-4}, 2.06, 1.50), (-1.10 \times 10^{-4}, 33.02, 33.02, 2.47), (2.78 \times 10^{-6}, 116.78, 3.36)$, 能够很好地拟合其衰变行为。参考文献 21 中原子尺度的模拟显示宽度 $w = 5.6 \text{ nm}$, 高度 $h = 2.8 \text{ nm}$ (即 $\alpha = 27^\circ$) 的金字塔形岛能被近似地看成点力偶极子 ($\gamma = 3$)。计算结果给出 $\gamma = 2.47$, 接近于文献 21 中的值 $\gamma = 3$ 。

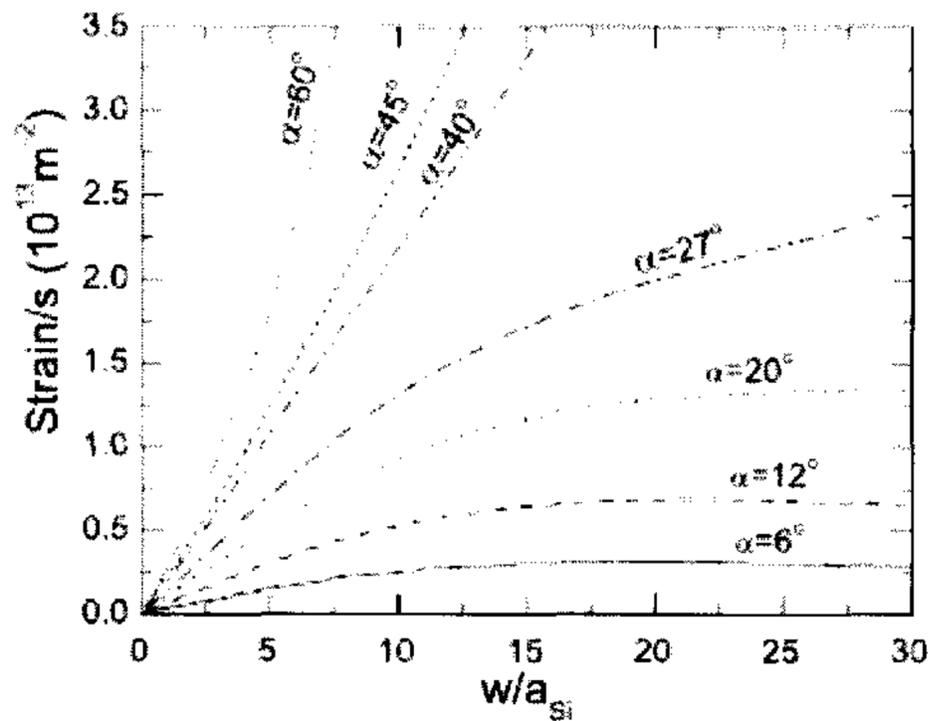


图 3-9: $H = 81ML$ 时不同倾斜角的岛在 $x = y = z = 0$ 处产生的标准化应变 ε/s 随岛宽度变化的函数。

应变对岛的尺寸依赖关系也显示出有趣的特性。图 3-9 显示隔离层厚度 $H = 81ML$ 时不同倾斜角的金字塔形岛在点 $x = y = z = 0$ 处的应变随岛宽度变化的函数。这里将应变进行了标准化,即将应变除以岛的表面积 s ($s = 4wh/\sin(\alpha)$) 后得到的值。从图中可以清楚地看到: 当岛的宽度相对于隔离层厚度较小时, 标准化后的应变与岛

的宽度成正比,即应变与岛的体积成正比,与点力偶极子模型一致;当岛的宽度相对于隔离层厚度较大时,应变对岛的依赖关系主要取决于岛的倾斜角。当岛的倾斜角 $\alpha < 20^\circ$ 时,标准化应变随岛宽度的增大而缓慢地增加,即应变近似地与岛的表面积成正比;当 $20^\circ < \alpha < 45^\circ$ 时,与岛的尺寸较小时一样,标准化应变与岛的宽度成正比,即应变与岛的体积成正比;当 $\alpha > 45^\circ$ 时,对体积的依赖还超出了正比关系。对于尺寸 $(w,h) = (20a_{si},17ML), (15a_{si},13ML), (10a_{si},9ML)$ 的金字塔形 Ge 岛(倾斜角都是 $\alpha = 12^\circ$)。图 3-9 显示应变近似地与岛的表面积成正比,与参考文献 61 中原子尺度模拟的结果一致。对于尺寸 $w = 2h = 5.6\text{nm}$,即 $\alpha = 27^\circ$ 的金字塔形 Ge 岛,图 3-9 显示应变近似地与岛的体积成正比,与参考文献 60 中原子尺度模拟的结果一致。

基于连续介质理论,使用 Ge/Si 系统作为一个特别的例子,对金字塔形埋藏岛产生的表面应变场进行了分析。发现连续介质理论格林函数方法得到的结果和大规模计算模拟得到的结果完全类似,有力地证明了格林函数方法的有效性。显示当隔离层厚度较小时,埋藏岛的形状对应变场有非常关键的影响。岛的倾斜角越小,应变对隔离层厚度的依赖就越偏离点力偶极子模型。另外,值得强调的是,当隔离层厚度很大时,埋藏岛能被看成是点力偶极子。但是这个区域不是人们所关心的,因为它没有什么实际应用的意义。

第三节 本章小结

基于薄块在隔离层表面产生的静水应变场的解析式,我们详细分析了正方形薄块引起的表面应变场分布,同时复述了导师关于金字塔形岛引起的表面应变场分布的研究工作。研究表明埋藏岛的形状对应变场有非常关键的影响,不同形状的埋藏岛对隔离层厚度和岛的体积有不同的依赖关系,只有当隔离层厚度相对于埋藏岛尺寸很大时,人们才能把埋藏岛处理成点力偶极子。

第四章 半导体量子点系统中应变调制的自组装

大多数半导体量子点元器件的应用要求量子点阵列具有高度的有序性。通过多层生长，量子点的尺寸均匀性和空间有序性都能得到极大的提高。

有几种模型用来解释多层生长中的自组装现象，比如通过分析应变改变了吸附原子的扩散路径导致大多数原子朝应变集中的地方运动^[6]；通过分析应变对形核中心的调制^[7,17]，或者考虑应变引起的岛的相互作用^[1]，或者用动力学蒙特卡洛模拟^[15,16]，都认为自组装现象是埋藏岛在隔离层表面产生的应变场导致的。他们最初阐明自组装现象在各向同性系统比如 Ge/Si 和 InAs/GaAs，通过把埋藏岛处理成零维的点力偶极子^[6,7,15,16]。事实上，如前面所阐明的，埋藏岛的长度、宽度甚至高度的大小经常和隔离层的厚度可相比拟，为了更好地理解多层生长中的自组装过程，必须考虑埋藏岛的尺寸效应。考虑到埋藏岛的底部尺寸与高度的比值很大，后来 Liu 等把埋藏岛处理成长条形夹杂物^[17]，这样，隔离层厚度与岛宽度相近，但是远大于岛的高度。在这些模型中，隔离层表面只有在埋藏岛中心的上方才会出现拉应变的极值，由此，表面岛优先在埋藏岛的上方形核，出现垂直堆垛的实验现象^[6-10]。然而，最近科学家们观测到了一个明显不同的实验现象—局部自组装，即当岛的高度接近隔离层厚度时，降低生长温度，有序的 Ge 岛团簇将出现在埋藏 Ge 岛的上方^[14]。这种量子点团簇可用来充当具有广泛应用前景的元胞自动机的基胞^[65]，它在量子信息处理的分子合成中也具有非常重要的应用价值^[74]。Ge/Si 系统的各向异性很弱，局部自组装不可能是由于各向异性效应，G. Capellini 等人^[14]认为这是由于邻近表面岛之间的相互排斥作用。尽管岛的相互作用能够导致某种程度的岛的有序性^[40]，但不能解释为什么表面岛和埋藏岛具有相同的取向和对称性。为了更好地控制有序岛阵列的生长，人们必须清楚地理解局部自组装的生长机制。基于长方体产生的表面应变场，我们的研究显示岛的局部自组装是有限尺寸的埋藏岛引起的表面应变场对岛的

形核中心的调制引起的，近乎完美地解释了实验观测。

在以前所有关于多层生长自组装现象的讨论中，人们仅考虑了埋藏岛引起的表面应变场。然而，由于晶格失配，表面岛也会产生应变场。我们发现表面岛将在它的周围产生一个压应变场，压应变的大小和埋藏岛引起的拉应变的大小经常可相比拟。为此，我们提出了一个新的模型来解释多层生长的自组装现象，认为该现象是埋藏岛和表面岛产生的应变场共同作用的结果，基于薄块产生的表面应变场，我们的计算模拟成功地说明了实验现象。我们基于薄块而不是长方形产生的表面应变场主要原因是大多数实验中埋藏岛能近似看作薄块，它不会影响计算结果且可以简化计算。值得提出的是，在解释局部自组装的时候，我们没有考虑表面岛产生的应变场，主要是考虑到该实验中埋藏岛的体积很大，表面岛产生的应变场相对较小，我们忽略了表面岛的作用。

第一节 量子点系统中岛的局部自组装

我们的研究表明，量子点系统中岛的局部自组装，是有限尺寸的埋藏岛引起的表面应变场对岛的形核中心的调制引起的。对于宽度与高度比值很大的长方体形埋藏岛，当隔离层厚度接近于岛的高度时，表面应变场有四个对称分布的应变极值出现在埋藏岛的上方。应变极值位置显示出与埋藏岛底部相同的对称性和取向。随着隔离层厚度的增加，四个应变极大值消失，同时在隔离层厚度相对岛宽度很小的一个较大范围内埋藏岛上方不同位置的应变值近似相等。不同于点力偶极子模型，埋藏岛对应变分布的尺寸效应告诉我们在埋藏岛上方生长具有对称性还是不具对称性的岛团簇依赖于隔离层厚度和生长温度。我们的理论结果近乎完美地说明了最近 Ge/Si 系统的实验观测。

由方程(2.3.2)，可得长、宽、高分别为 w_x, w_y, h 的长方体夹杂物在厚度为 H 的隔离层表面产生的静水应变场为：

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon^*(1+\nu)(1-2\nu)}{\pi(1-\nu)} \sum_{i=1,j,k}^2 (-1)^{i+j+k} \times \arctan \frac{x_i y_j}{z_k \sqrt{x_i^2 + y_j^2 + z_k^2}} \quad (4.1.1)$$

其中, $x_i = x \pm w_x/2$, $y_j = y \pm w_y/2$, $z_1 = H$, $z_2 = H - h$, ν 是隔离层材料的泊松比, $\varepsilon^* = (a_i - a_s)/a_i$ 是晶格失配常数, 这里 a_i 和 a_s 分别是夹杂物和隔离层材料的晶格常数。对于 Ge/Si 系统, 取 $a_i = a_{Ge} = 5.656 \text{ nm}$, $a_s = a_{Si} = 5.431 \text{ nm}$, $\nu = 0.218$ 。为了便于和实验结果比较, 考虑 $w_x = w_y = w$ 。

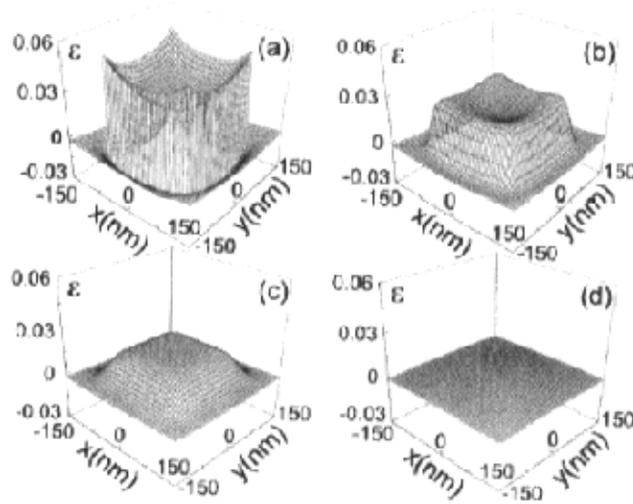


图 4-1: 隔离层厚度 H 不同时 $w = 200 \text{ nm}$, $h = 34.9 \text{ nm}$ 的埋藏 Ge 岛在 Si 表面产生的应变场。(a) $H = 35 \text{ nm}$, (b) $H = 45 \text{ nm}$, (c) $H = 65 \text{ nm}$, (d) $H = 200 \text{ nm}$ 。

图 4-1 显示不同 H 时 $w = 200 \text{ nm}$, $h = 34.9 \text{ nm}$ 的埋藏 Ge 岛在 Si 隔离层表面产生的应变场。参数 w 和 H 直接来源于实验, 基于实验观测, 选取岛的高度略低于 35 nm 。由图 4-1(a)-(c) 我们容易看出, 当 $H \leq 65 \text{ nm}$ 时, 埋藏岛上方一个有限区域的表面应变远大于其它位置的表面应变, 而且应变随 H 的增大而减小。不同的 H 范围, 显示

出不同的行为, 当 $H \sim h$ 时, 有四个应变极大值位置和埋藏岛底部具有相同的对称性和取向(见图 4-1(a)和 4-1(b))。我们发现当 H 接近 h 时, 应变极大值接近埋藏岛中心位置上方应变的 2.5 倍。在区域 $H \sim w/4 + h/2$, 埋藏岛上方表面显示出近乎相等的应变值(见图 4-1(c))。当 H 很大时, 如图 4-1(d)所示, 只有一个很小的表面应变分布。由图 4-1(a)-(c)可知, 当 H 很小时(相对于 w), 表面应变分布完全不同于点力偶极子模型, 点力偶极子只会在它的正上方产生一个应变极值。我们的详细分析显示出只有当 $H > 2w$ 时才可以近似用力偶极子模型来描述。

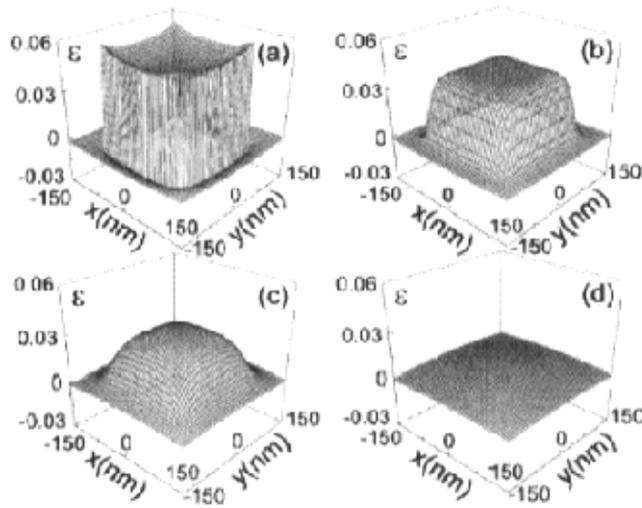


图 4-2: 最后一层隔离层厚度 H 不同时, 五个垂直堆垛的 $w = 200 \text{ nm}$, $h = 34.9 \text{ nm}$ 的 Ge 岛组成的模块在 Si 表面产生的应变场。(a) $H = 35 \text{ nm}$, (b) $H = 45 \text{ nm}$, (c) $H = 65 \text{ nm}$, (d) $H = 200 \text{ nm}$ 。

我们又进一步研究了由垂直堆垛的一系列埋藏岛组成的模块产生的表面应变场和上面描述的具有相同的特性。在实验中, 岛团簇是生长在由十层堆垛岛组成的模块上面^[14]。生长多层岛的作用就是获得均匀分布的岛阵列^[6-10]。我们的计算表明在模块中只有上面几

层埋藏岛对表面应变场有明显的贡献。图 4-2 显示五个堆垛的 Ge 岛模块在最后的 Si 隔离层表面引起的应变场分布。如实验所取, 模块中 Si 隔离层的厚度为 60nm。埋藏岛尺寸的取值和图 4-1 中一致。比较图 4-1 和图 4-2, 我们能看到堆垛岛组成的模块产生的表面应变场和单个埋藏岛产生的表面应变场具有相同的特性。图 4-3 显示从具有四个应变极大值区域转变到具有相同应变值区域的隔离层厚度出现在 49nm。在大于该转变值的一个比较大的范围内 (从 49nm 到 70nm), 我们发现埋藏岛上方 46nm \times 46nm 区域中的应变值几乎处处相等。

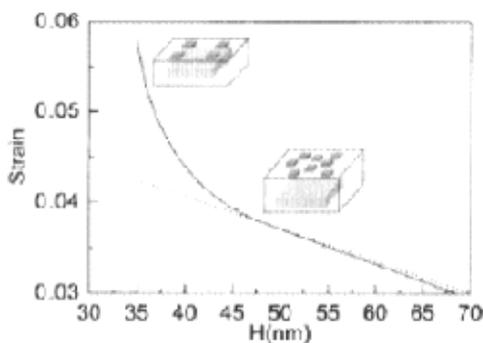


图 4-3: 五个垂直堆垛的 $w = 200 \text{ nm}$, $h = 34.9 \text{ nm}$ 的 Ge 岛组成的模块在 Si 表面不同位置处产生的应变场随最后一个隔离层厚度 H 变化的函数。实线对应 $H < 49 \text{ nm}$ 时的应变极大值和 $H \geq 49 \text{ nm}$ 时尺寸为 $46 \text{ nm} \times 46 \text{ nm}$ 的正方形的角位置处的应变值。点线对应埋藏岛中心正上方处的应变。插图显示不同 H 区域时表面不同类型的岛团簇的分布。

下面应用我们的发现来分析实验观测结果。我们的分析是基于一个被广泛接受的概念, 即岛优先形核在隔离层表面的拉应变区域^[2,17]。从图 4-1 和图 4-2, 我们能看到当 H 接近 h 时, 四个应变的极大值远大于其它位置的应变值。在这种情况下, 如图 4-2 所阐明的, 我们期望四个岛形核在应变的极大值区域。当然, 为了完美的定位表面岛的位置, 必须很好地控制各种生长条件。当升高生长温度或

者是隔离层厚度相对较大时, 由于吸附原子动力学能量增大, 表面不同位置处的能量之差不足以限制它们在局部的应变极大值区域。在 $H \sim h$ 的区域, 实验显示把生长温度从 750°C 降低到 600°C 导致岛团簇出现在堆垛的埋藏岛上^[14]。当 $H = 35\text{ nm}$ 时, 四个表面岛出现在埋藏岛上方, 它们和埋藏岛底部具有相同对称性和取向, 这个实验观测结果与我们的理论分析很好地吻合了。从图 4-2 和图 4-3, 我们也可看出在区域 $45\text{ nm} \leq H \leq 70\text{ nm}$ 埋藏岛上方的表面应变场几乎为常数值, 那样, 表面岛团簇就会优先形核在埋藏岛的上方, 而每个团簇里表面岛的形核位置具有随机性。实验中, 当 $H = 45\text{ nm}$ 和 65 nm 时, 表面岛形成团簇但是每个岛位置具有随机性。我们的结果又一次很好地解释了实验^[14]。最后实验显示当 $H = 200\text{ nm}$ 时, 因埋藏岛产生的应变太小, 表面岛随机地分布在整个表面上^[14]。

通过合适的选择隔离层厚度和生长温度, 埋藏岛的有限尺寸效应引起的应变场分布允许人们在埋藏岛上方生长具有对称性分布还是不具对称性分布的岛团簇。我们的理论结果完美地说明了最近的实验, 显示岛的局部自组装的生长机制是应变对形核中心的调制而不是邻近岛之间的相互排斥作用。我们的发现为生长有序的量子点分子和控制量子点阵列的空间有序性开辟了一个新的途径。

第二节 多层异质外延生长中量子点的自组装

我们提出一个新的模型来阐明多层异质外延生长中岛的自组装过程。我们的模型基于岛的优先形核和生长在埋藏岛和生长的表面岛在隔离层表面产生的总应变为拉应变的区域, 埋藏岛引起的应变场控制表面岛的位置, 生长的表面岛将产生压应变, 该压应变对控制表面岛的尺寸起着关键性的作用。也就是说, 表面岛首先形核在埋藏岛引起的拉应变区域里, 表面岛的尺寸逐渐增大, 同时在隔离层表面引起了一个逐渐增大的压应变, 当表面岛周围的总应变场变为压应变时, 它就会停止生长, 此时岛的尺寸即为它的临界尺寸。我们的模型预言在岛阵列分布稀疏的情况下, 不同尺寸的岛逐渐到

达一个共同的尺寸，形成垂直堆垛的岛阵列。在岛阵列分布密集的情况下，随着堆垛层数的增加，岛的尺寸分布和空间有序性都会得到极大的提高，在这种情况下，邻近大岛的小岛会逐渐接近大岛最后被大岛兼并，相邻的小岛则会合并成一个大岛，另一方面，两个相邻的大岛会相互排斥。我们的理论预言能很好地解释实验观测。

我们选择 Ge/Si 结构作为例子来阐明我们的模型。一般情况下埋藏岛高度与宽度的比值很小，我们考虑 Ge 岛为二维薄块。薄块的长宽高分别设为 l, w, h ，其中 h 远小于 l 和 w 。由方程(2.2.3)，可得中心位于点 $(0, 0, -d)$ 处的埋藏薄块在隔离层表面引起的应变场为：

$$\varepsilon_e = \frac{\varepsilon^*(1+\nu)(1-2\nu)}{\pi(1-\nu)} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 (-1)^{i+j} \times \frac{x_i y_j (x_i^2 + y_j^2 + 2d^2)}{(x_i^2 + d^2)(y_j^2 + d^2)(x_i^2 + y_j^2 + d^2)^{1/2}} \quad (4.2.1)$$

其中 $x_i = x \pm w/2$, ($i=1,2$), $y_j = y \pm w/2$, ($j=1,2$), ν 是隔离层材料的泊松比, $\varepsilon^* = (a_i - a_s)/a_i$ 是晶格失配常数, 这里 a_i 和 a_s 分别是夹杂物和隔离层材料的晶格常数。对于 Ge/Si 系统, 取 $a_i = a_{Ge} = 5.656 \text{ nm}$, $a_s = a_{Si} = 5.431 \text{ nm}$, $\nu = 0.218$ 。

表面岛产生的应变场, 人们可以通过原子尺度的分子动力学模拟和基于连续介质弹性理论的有限元方法来计算。在我们的研究中, 考虑到表面岛在隔离层表面产生的应变场 $\varepsilon_s(x, y)$ 还没有解析式, 我们近似地取方程(4.2.1) $d=0$ 时的值。由于表面岛是内聚岛, 它的底层原子为了和隔离层原子具有相同的原子间距离而受到力的作用, 会在隔离层表面产生压应变场。在连续介质弹性理论中, 表面岛底层原子可以认为是 $d=0$ 的埋藏层。考虑到表面岛上层原子会减小底层原子产生的应变场, 我们可以近似地取表面岛周围的表面应变场为：

$$\varepsilon_s(x, y) = \lambda \varepsilon_e(x, y) \quad (d=0, w=w_s, l=l_s, h=1ML) \quad (4.2.2)$$

其中 w_s 和 l_s 是表面岛的宽度和长度, $\lambda \leq 1$ 是拟合参数。我们比较这个近似的结果和原子尺度的模拟结果^[49], 发现能很好地一致。埋藏岛和表面岛在区域 $|x| > w_s/2, |y| > l_s/2$ 产生的总表面应变场 $\varepsilon(x, y)$

$= \varepsilon_e(x, y) + \varepsilon_s(x, y)$ 。由于 λ 的取值不改变定性的结果，因此我们取 $\lambda = 1$ 。为了便于表达，我们考虑岛为四方形薄块，即 $l \equiv w$ ， $l_s \equiv w_s$ 。

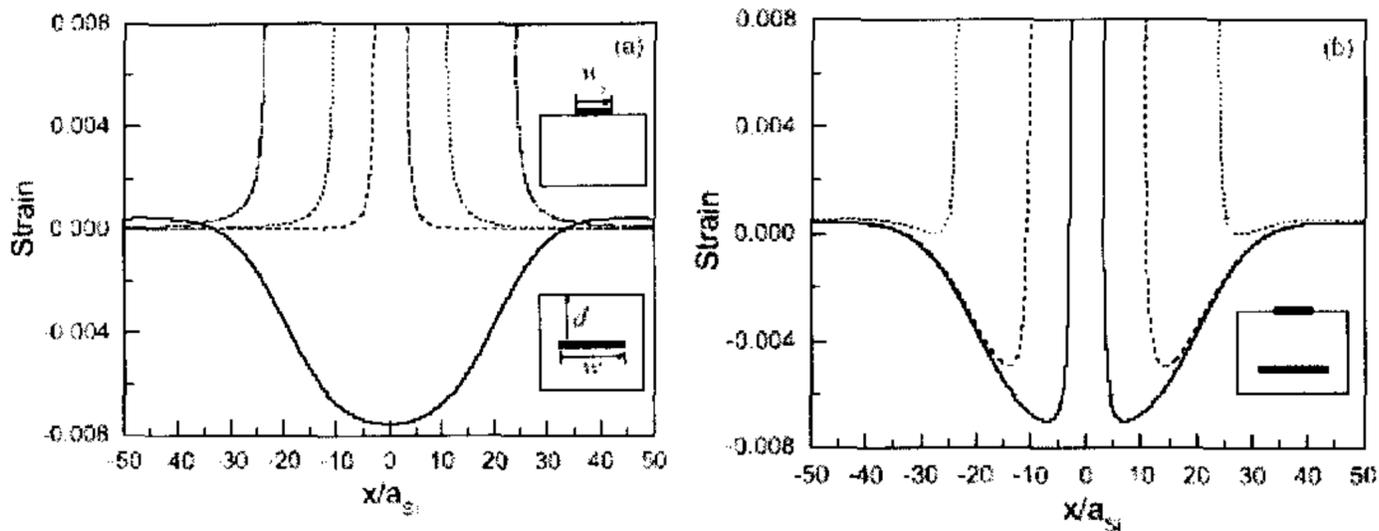


图 4-4: 隔离层表面的应变场分布。(a) 实线对应 $d = 80ML$ 时 $w = 40a_{Si}$ 的埋藏岛产生的应变场 $-\varepsilon_e(x, y = 0)$ ，虚线、点线和点虚线分别对应 $w_s = 5a_{Si}, 20a_{Si}$ 和 $46a_{Si}$ 的表面岛产生的应变场 $-\varepsilon_s(x, y = 0)$ ；(b) $w_s = 5a_{Si}, 20a_{Si}$ 和 $46a_{Si}$ 时的总应变场 $-\varepsilon = -(\varepsilon_e + \varepsilon_s)$ 。插图图示地显示表面岛和埋藏岛。

图 4-4 显示表面岛尺寸增大时总应变场的变化。图 4-4 中埋藏岛的宽度和高度分别为 $w = 40a_{Si}, h = 20ML$ 。图 4-4 (a) 分别显示埋藏岛产生的应变场和 $w_s = 5a_{Si}, 20a_{Si}$ 和 $46a_{Si}$ 的表面岛产生的应变场。从图 4-4 (a) 中我们能看到埋藏岛上方区域的 ε_e 是拉应变。然而表面岛产生的 ε_s 都为压应变。而且表面岛的尺寸越大，它所产生的压应变也越大。图 4-4 (b) 显示 ε_e 和 ε_s 叠加后的总应变 $\varepsilon(x, y = 0)$ 。我们能清楚地看到随着表面岛尺寸的变化总应变发生了很大的变化，对于一个很小的表面岛，它周围的总应变仍然为拉应变，随着表面岛尺寸的增加，总应变为拉应变的区域逐渐减小，当表面岛达到临界尺寸 $w_c = 46a_{Si}$ 时，它的周围不再有拉应变区域存在。

隔离层表面的应变场控制着表面岛的生长。让我们首先考虑稀疏岛阵列的情况，此时不同埋藏岛产生的应变场的叠加可以忽略。由于表面岛在拉应变位置有更高的形核几率，表面岛会优先在埋藏岛引起的拉应变极大值位置形核^[7]，随着表面岛的长大，它周围的

应变场也将不断地改变，当表面岛达到临界尺寸 w_c ，由于周围的总应变场不存在拉应变，它将停止生长，在这种情况下，隔离层表面的吸附原子会优先在其它拉应变位置形核。只有当表面岛开始在压应变位置形核的时候，表面岛的尺寸才可能大于 w_c ，此时会导致表面岛的密度增大。因为自组装的情况下没有出现岛密度增大的情况，所以埋藏岛上方表面岛的尺寸为 w_c 。

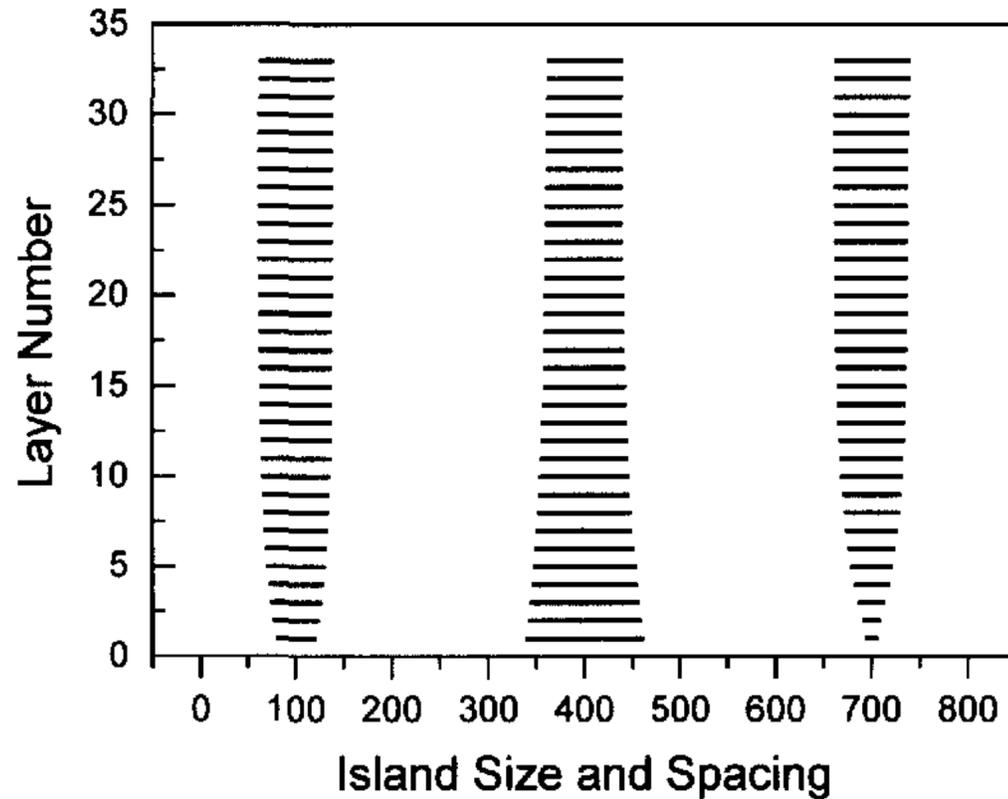


图 4-5: 多层生长中岛阵列分布稀疏的情况下岛的尺寸演化。隔离层厚度 $d = 80ML$ ，岛的最初尺寸分别为 $w = 10a_{Si}, 40a_{Si}, 120a_{Si}$ ，多层生长后达到共同的尺寸 $w = 75a_{Si}$ 。

我们发现 w_c 是埋藏岛尺寸的函数。一方面小埋藏岛的尺寸随着堆垛层数的增加变得越来越大，最终达到一个恒定值 w^* ，另一方面大埋藏岛的尺寸随着堆垛层数的增加变得越来越小，最终达到一个恒定值 w^* 。多层堆垛后表面岛达到一个共同的尺寸 w^* ，它与最初岛的尺寸无关。从图 4-5 中，我们能清楚地看出最初尺寸分别为 $w = 10a_{Si}, 40a_{Si}, 120a_{Si}$ 的稀疏岛阵列经多层生长后收敛到一个共同的尺寸，其中取 $d = 80ML$ ， $h = 20ML$ 。即 $w = 10a_{Si}$ 和 $40a_{Si}$ 的两个小岛逐渐增大到尺寸 $w = w^* = 75a_{Si}$ ，而 $w = 120a_{Si}$ 的大岛逐渐减小到 $75a_{Si}$ 。

详细分析发现 w^* 仅仅依赖于隔离层厚度 d ， d 越小 w^* 越小。

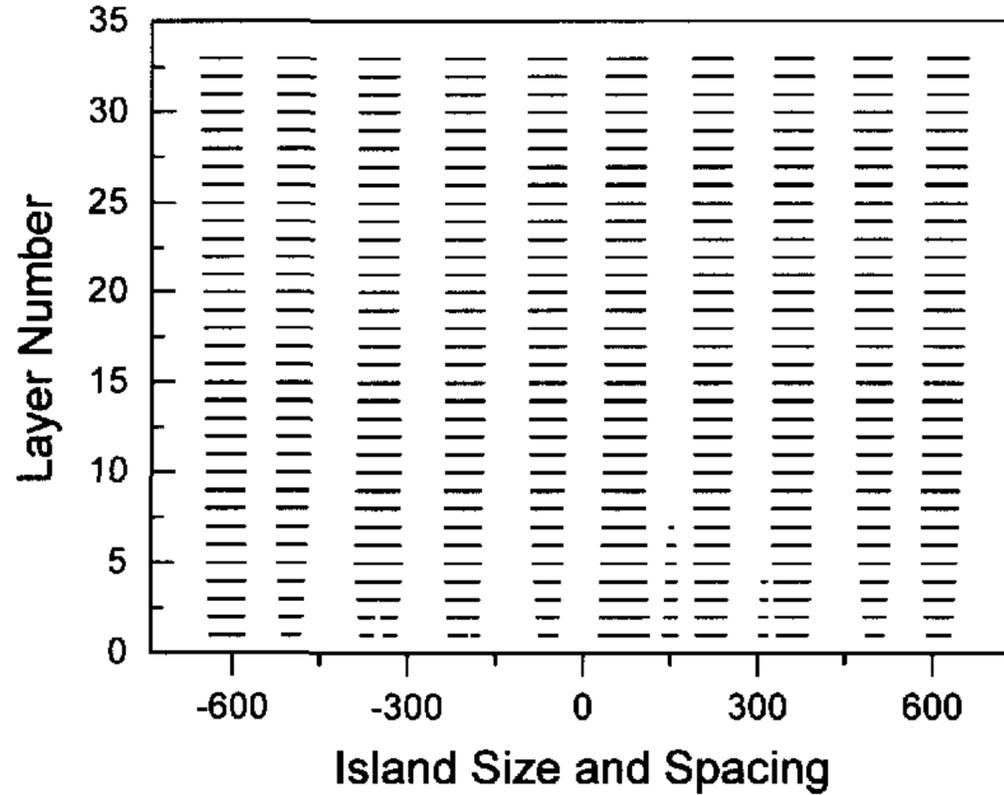


图 4-6: 多层生长中岛阵列分布密集的情况下岛的尺寸和位置的演化。隔离层厚度 $d = 80ML$ 。最初岛的位置和尺寸是随机分布的, 尺寸分布范围从 $w = 12a_{Si}$ 到 $w = 84a_{Si}$, 多层生长后岛的空间位置变得非常均匀, 尺寸分布收敛到一个很窄的范围 $w = 61a_{Si}$ 到 $67a_{Si}$ 。

在岛阵列分布密集的情况下, 我们的模型预言多层生长后岛的尺寸均匀性和空间有序性都会得到极大的提高。图 4-6 显示了密集分布的岛阵列演化的例子。在图 4-6 中, 最初岛的位置, 岛间的距离及岛的尺寸是随机选择的。下一层表面岛在前一层埋藏岛阵列产生的拉应变的各个局部极大值处形核。表面岛的尺寸 w_c 是通过计算埋藏岛和表面岛产生的总应变场得到的。从图 4-6, 我们能看多层生长后岛的尺寸均匀性和空间有序性都得到了极大的提高, 岛阵列最初的尺寸分布在 $12a_{Si}$ 到 $84a_{Si}$ 的范围, 然而多层生长后收敛到 $61a_{Si}$ 到 $67a_{Si}$ 的狭窄范围。岛的空间有序性的通过下面三个过程: (1) 邻近大岛的小岛逐渐接近大岛最后被大岛所兼并; (2) 相邻的小岛合并成一个大岛; (3) 相邻的大岛相互排斥。

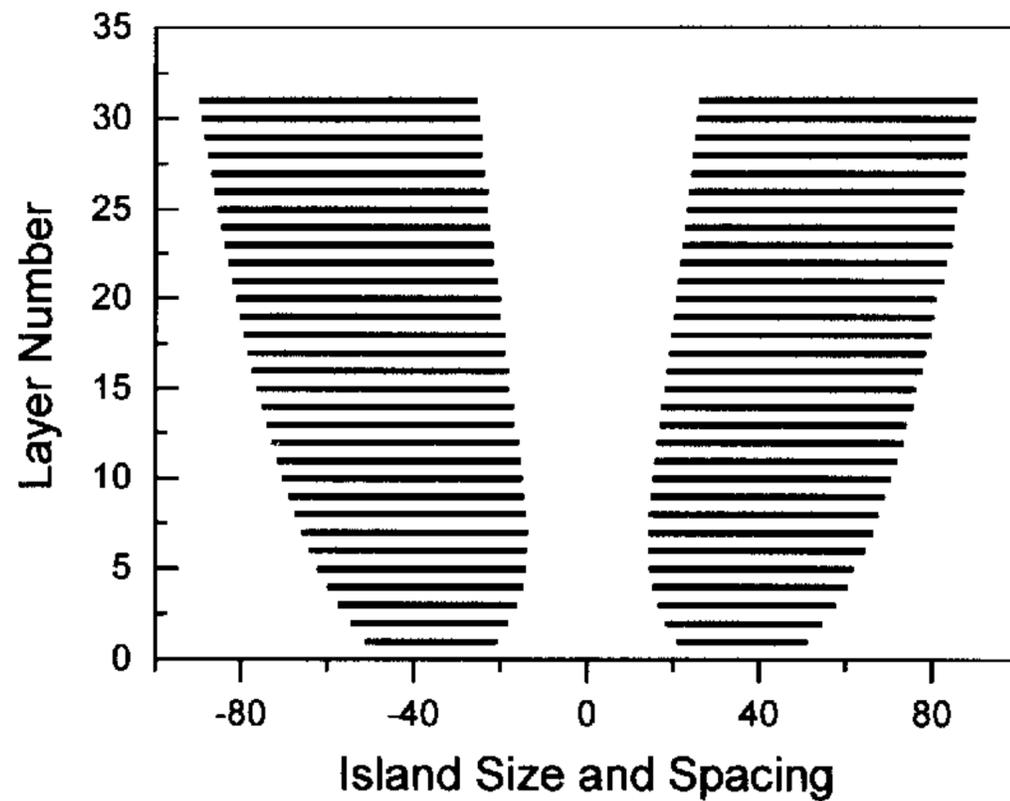


图 4-7: 多层生长中岛的尺寸和位置的演化。隔离层厚度 $d = 80ML$ ，两个岛最初尺寸为 $w = 30a_{Si}$ ，多层生长后达到相同的尺寸 $w = 64a_{Si}$ 。岛的中心离开了他们最初的位置，形成倾斜排列的岛阵列。

通过以上的讨论，我们看到大岛间的相互排斥作用是获得空间有序性的一个主要的过程。为了理解这个详细的过程，图 4-7 显示了最初尺寸为 $w = 30a_{Si}$ 的两列岛的演化过程。从图 4-7 中，我们能看到不同列的岛随着堆垛层数的增加逐渐长大然后达到共同的尺寸，如图 4-6 所示的一样。然而与图 4-6 不同的是图 4-7 中的两列岛不再是垂直排列。这种倾斜排列的现象与最近的实验观测一致^[75]。我们注意到图 4-7 中之所以会出现倾斜排列是由于两列岛的周围没有邻近岛。在这种情况下，一列表面岛产生的压应变改变了另一列埋藏岛产生的拉应变中心，使它离开了本来的位置，而出现倾斜排列现象。在图 4-6 中岛阵列分布密集的情况下，邻近的岛在不同方向诱发了同样的排斥作用，岛阵列获得均匀的尺寸和空间分布后它们的中心位置不再改变，形成垂直排列的阵列。

我们提出了一个新的模型阐明多层异质外延生长中岛的自组

装过程。不同于已有的模型，我们的模型认为岛优先形核和生长在埋藏岛和生长的表面岛在隔离层表面产生的总应变为拉应变的区域。新的模型预言：在岛阵列分布稀疏的情况下，任意尺寸的岛逐渐达到一个共同的尺寸，形成垂直堆垛的岛阵列；在岛阵列分布密集的情况下，随着堆垛层数的增加，岛的尺寸分布和空间有序性都会得到极大的提高。我们还研究了长方形岛的演化情况，发现经多层生长后长方形岛会逐渐变成正方形岛，导致所有的岛具有相同的形状^[17]。值得提出的是我们的大多数结果，比如岛的垂直排列、岛尺寸和空间均匀性的提高，与 Liu 等人提出的模型得到的结果相一致^[72]。在他们的模型中没有考虑表面岛产生的应变场的作用，但为了限制经多层生长后岛的逐渐增大，他们假定了表面岛的尺寸小于埋藏岛引起的拉应变区域的尺寸。在我们的模型中，认为是生长的表面岛产生的压应变场限制了经多层生长后岛的逐渐增大。不过还得指出的是，实际上应变岛阵列的自组装生长是一个非常复杂的过程，它涉及到很多的生长参数，比如生长温度、沉积速率及位错、缺陷等。我们的模型主要检查生长的表面岛产生的表面应变场对岛尺寸和位置的影响，适合于在合适的生长温度和沉积速率范围内，正如其它理论和实验所讨论的^[6-8,17]，在这种生长条件下岛能够优先形核在拉应变区域。在生长温度过高、过低或者沉积速率过大的情况下，埋藏岛和生长的表面岛产生的表面应变场的作用就没有那么明显了，我们的模型应用到这种情况会有局限性。此外，为了便于讨论生长的表面岛产生的表面应变场的重要性，我们象参考文献 7 中讨论的一样假设当表面应变不存在拉应变时表面岛便停止生长。这种假定主要基于表面应变场对岛的稳定性有重要影响的考虑，当岛的稳定性对岛的化学势（与岛的尺寸、曲率、应变及密度等有关）有重要依赖性时，这种假定是无效的。

第三节 本章小结

通过本章的讨论，我们发现在量子点系统中，岛的局部自组装

的原因是有限尺寸的埋藏岛引起的表面应变场对岛的形核中心的调制，而不是邻近岛之间的相互排斥作用。合理地选择不同的隔离层厚度和生长温度，可以决定在埋藏岛上方生长具有对称性分布还是不具对称性分布的岛团簇。多层异质外延生长中，自组装过程是埋藏岛和表面岛产生的总应变场共同作用的结果。埋藏岛引起的应变场控制着表面岛的位置，生长的表面岛产生的压应变对控制表面岛的尺寸起着关键性的作用。

第五章 总结与展望

第一节 总结

半导体量子点在光子、电子及光电子设备中具有广泛的应用前景。应变自组装是获取高质量半导体量子点的有效方法。基于连续介质理论格林函数方法，本论文尝试着对自组装生长中部分实验现象进行了理论探讨，得到了一些有益的结果，具体归纳于下：

1. 基于半无限空间中点力偶极子在表面产生的应变场的解析式，得到了半无限空间中长方形薄片夹杂物和长方体夹杂物产生的表面静水应变场的解析式。
2. 基于半无限空间中长方形薄片产生的表面应变场，详细地分析了正方形薄片在隔离层表面产生的应变场。发现不同于点力偶极子和金字塔形岛产生的应变对隔离层厚度有确定的指数依赖关系，薄片产生的应变对隔离层厚度没有具体的指数依赖关系。体积对应变的影响也显示出奇异的特性，随着体积的增加，当岛的体积即薄片的宽度超过某一值时，它所产生的应变非但不会增加反而会减小。连同导师先前关于金字塔形岛产生的表面应变场的研究工作，我们进一步证实了埋藏岛的形状对应变场分布有关键性的影响，不同形状的埋藏岛对隔离层厚度和岛的体积有不同的依赖关系，只有当隔离层的厚度相对于埋藏岛的线性尺寸很大时，才能把埋藏岛处理成点力偶极子。
3. 发现在量子点系统中，岛的局部自组装的原因是有限尺寸的埋藏岛引起的表面应变场对岛的形核中心的调制，而不是邻近岛间的相互排斥作用。合理选择不同的隔离层厚度和生长温度，可以决定在埋藏岛上方生长具有对称性分布还是不具对称性分布的岛团簇。我们的发现为生长有序的量子点开辟了一个新的途径。
4. 提出多层异质外延生长中的自组装过程是埋藏岛和表面岛产生的总应变场共同作用的结果。埋藏岛引起的应变场控制着表面岛的位置，生长的表面岛产生的应变对控制表面岛的尺寸起着非常

重要的作用。我们的模型预言，多层生长后将得到尺寸均匀和空间有序的量子点阵列，成功地说明了实验观测，为进一步提高量子点系统的质量提供了有益的指导。

第二节 展望

自组装生长半导体量子点是当前国际上广泛研究的热点。美国科学情报所 (ISI) 的统计显示，自 1993 年以来该领域每年发表的研究论文的数量以指数形式递增。尽管我们在自组装生长半导体量子点方面取得了一些有益的理论结果，但深知这仅仅是沧海一粟，还有很多重要的理论和实验问题有待解决。就本文所探讨的问题，我们觉得还可以从如下方面开展深一步的研究：

1. 大多数的理论都是把 Ge/Si, InAs/GaAs 等处理成各向同性系统，实际上还是存在一些由于各向异性所引起的特性。对于 CdZnSe/ZnSe, PbSe/PbEuTe 等具有很强各向异性的系统引起的各种实验现象还有待人们发展更好的理论模型。
2. 表面应变岛产生的应变场是影响表面生长的重要因素，然而我们得到的关于表面岛产生的应变场的公式太粗糙，有待进一步完善。
3. 异质外延的表面生长实际上是一个非常复杂的过程，应变是影响生长的主要因素但不是唯一因素，真正的生长需要考虑生长温度、沉积速度等各种参数，可以基于表面的化学势分布进行动力学蒙特卡洛模拟。
4. 晶格失配常数、生长温度及沉积速度等参数对表面岛的形状、大小及空间分布的影响，岛的热稳定性，岛生长过程和被覆盖过程中与周围材料的互扩散行为，岛中成分分布及如何有效控制互扩散行为等问题中还有很多有益的工作等待人们更深入的研究。
5. 应变对材料的能带结构即设备的光电子性能有重要影响，如何精确高效地计算系统的能带结构，解释它们奇特的光电子特性，进而提高光电子设备的性能或者按能带工程构造出期望的半导体量子点设备等等都将是研究的热点课题。

参 考 文 献

- [1] Vitaly A. Shchukin and Dieter Bimberg, Spontaneous ordering of nanostructures on crystal surfaces, *Rev. Mod. Phys.* 71, (1999), 1125~1171.
- [2] Karl Brunner, Si/Ge nanostructures, *Rep. Prog. Phys.* 65 (2002), 27~72.
- [3] L. Goldstein, F. Glas, J. Y. Marzin, M. N. Charasse and G. Le Roux, Growth by molecular beam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strained-layer superlattices, *Appl. Phys. Lett.* 47 (1985), 1099~1101.
- [4] D. J. Eaglesham, and M. Cerullo, Dislocation-free Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(100), *Phys. Rev. Lett.* 64 (1990), 1943~1946.
- [5] Y.-W. Mo, D. E. Savage, B. S. Swartzentruber, and M. G. Lagally, Kinetic pathway in Stranski-Krastanov growth of Ge on Si(001), *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990), 1020~1023.
- [6] Qianghua Xie, Anupam Madhukar, Ping Chen, and Nobuhiko P. Kobayashi, Vertically Self-Organized InAs Quantum Box Islands on GaAs(100), *Phys. Rev. Lett.* 75 (1995) 2542~2545.
- [7] J. Tersoff, C. Teichert, and M. G. Lagally, Self-Organization in Growth of Quantum Dot Superlattices, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 1675~1678.
- [8] C. Teichert and M. G. Lagally, L. J. Peticolas and J. C. Bean, J. Tersoff, Stress-induced self-organization of nanoscale structures in SiGe/Si multilayer films, *Phys. Rev. B* 53 (1996) 16334~16337.
- [9] Vinh Le Thanh, V. Yam, and P. Boucaud et al., Vertically self-organized Ge/Si(001) quantum dots in multilayer structures, *Phys. Rev. B* 60 (1999), 5851~5857.
- [10] G. S. Solomon, J. A. Trezza, A. F. Marshall, and J. S. Harris, Jr., Vertically Aligned and Electronically Coupled Growth Induced InAs Islands in GaAs, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996), 952~955.
- [11] M. Strassburg et al., Gain studies of (Cd, Zn)Se quantum islands in a ZnSe matrix, *Appl. Phys. Lett.* 72 (1994), 942~944.
- [12] G. Springholz, V. Holy, M. Pinczolit, G. Bauer, Self-Organized Growth of Three-Dimensional Quantum-Dot Crystals with fcc-Like Stacking and a Tunable Lattice Constant, *Science* 282 (1998), 734~737.
- [13] V. Holý, G. Springholz, M. Pinczolit, and G. Bauer, Strain Induced Vertical and

- Lateral Correlations in Quantum Dot Superlattices, *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999), 356~359.
- [14] G. Capellini, M. De Seta, C. Spinella, F. Evangelisti, Ordering self-assembled islands without substrate patterning, *Appl. Phys. Lett.* 82 (2003), 1772~1774.
- [15] C.-S. Lee, B. Kahng, A.-L. Barabási, Spatial ordering of stacked quantum dots, *Appl. Phys. Lett.* 78 (2001), 984~986.
- [16] Pui-Man Lam and Sovirith Tan, Kinetic Monte Carlo model of self-organized quantum dot superlattices, *Phys. Rev. B* 64 (2001), 035321~035326.
- [17] Feng Liu, Sarah E. Davenport, Heather M. Evans, and M. G. Lagally, Self-Organized Replication of 3D Coherent Island Size and Shape in Multilayer Heteroepitaxial Films, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999), 2528~2530.
- [18] O. G. Schmidt and K. Eberl, Multiple layers of self-assembled Ge/Si islands: Photoluminescence, strain fields, material interdiffusion, and island formation, *Phys. Rev. B* 61 (2000), 13721~13729.
- [19] Q. X. Pei, C. Lu, and Y. Y. Wang, Effect of elastic anisotropy on the elastic fields and vertical alignment of quantum dots, *J. Appl. Phys.* 93 (2003), 1487~1492.
- [20] A. E. Romanov, G. E. Beltz and W. T. Fischer, P. M. Petroff and J. S. Speck, Elastic fields of quantum dots in subsurface layers, *J. Appl. Phys.* 89 (2001), 4523~4531.
- [21] I. Daruka and A.-L. Barabási, S. J. Zhou, T. C. Germann, P. S. Lomdahl, and A. R. Bishop, Molecular-dynamics investigation of the surface stress distribution in a Ge/Si quantum dot superlattice, *Phys. Rev. B* 60 (1999), R2150~R2153.
- [22] Maxim A. Makeev and Anupam Madhukar, Simulations of Atomic Level Stresses in Systems of Buried Ge/Si Islands, *Phys. Rev. Lett.* 86 (2001), 5542~5545.
- [23] J. R. Downes, D. A. Faux, and E. P. O'Reilly, A simple method for calculating strain distributions in quantum dot structures, *J. Appl. Phys.* 81 (1997), 6700~6702.
- [24] Jianxin Zhong, Jack C. Wells, Qian Niu and Zhenyu Zhang, Dependence of surface strain on island geometry in embedded quantum-dot systems, *Surf. Sci.*

- 539 (2003), L525-L530.
- [25] S. M. Hu, Stress from a parallelepipedic thermal inclusion in a semispace, *J. Appl. Phys.* 66 (1989), 2741~2743.
- [26] G. S. Pearson and D. A. Faux, Analytical solutions for pyramidal quantum dots, *J. Appl. Phys.* 88 (2000), 730~736.
- [27] A. Rastelli, E. Müller, H. von Känel, Shape preservation of Ge/Si(001) islands during Si capping, *Appl. Phys. Lett.* 80 (2002), 1438~1440.
- [28] J. Stangl, A. Hesse, V. Holý, Z. Zhong, and G. Bauer, U. Denker and O. G. Schmidt, Effect of overgrowth temperature on shape, strain, and composition of buried Ge islands deduced from x-ray diffraction, *Appl. Phys. Lett.* 82 (2003), 2251~2253.
- [29] D. Vanderbilt, and L. K. Wickham, Evolution of thin-film and surface microstructure, edited by C. V. Thompson, J. Y. Tsao and D. J. Srolovitz, *MRS Proceedings*, Vol. 202 (1991), 555-560.
- [30] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars, and P. M. Petroff, Direct formation of quantum-sized dots from uniform coherent islands of InGaAs on GaAs surfaces, *Appl. Phys. Lett.* 63 (1993), 3203~3205.
- [31] A. Madhukar, Q. Xie, P. Chen, and A. Konkar, Nature of strained InAs three-dimensional island formation and distribution on GaAs(100), *Appl. Phys. Lett.* 64 (1994), 2727~2729.
- [32] J. M. Moison, F. Houzay, F. Barthe, and L. Leprince, E. André and O. Vatel, Self-organized growth of regular nanometer-scale InAs dots on GaAs, *Appl. Phys. Lett.* 64 (1994), 196~198.
- [33] A. Ponchet, A. Le Corre, H. L'Haridon, B. Lambert, and S. Salaün, Relationship between self-organization and size of InAs islands on InP(001) grown by gas-source molecular beam epitaxy, *Appl. Phys. Lett.* 67 (1995), 1850~1852.
- [34] R. Leon, S. Fafard, D. Leonard, J. L. Merz, and P. M. Petroff, Visible luminescence from semiconductor quantum dots in large ensembles, *Appl. Phys. Lett.* 67 (1995), 521.
- [35] R. Apetz, L. Vescan, A. Hartmann, C. Dieker and H. Lüth, Photoluminescence and electroluminescence of SiGe dots fabricated by island growth, *Appl. Phys. Lett.* 66 (1995), 445~447.

- [36] P. Schittenhelm, M. Gail, J. Brunner, J. F. Nützel, and G. Abstreiter, Photoluminescence study of the crossover from two-dimensional to three-dimensional growth for Ge on Si(100), *Appl. Phys. Lett.* 67 (1995), 1292~1294.
- [37] S. H. Xin, P. D. Wang, Aie Yin, C. Kim, M. Dobrowolska, J. L. Merz, and J. K. Furdyna, Formation of self-assembling CdSe quantum dots on ZnSe by molecular beam epitaxy, *Appl. Phys. Lett.* 69 (1996), 3884~3886.
- [38] N. N. Ledentsov, M. Grundmann et al., Ordered arrays of quantum dots: Formation, electronic spectra, relaxation phenomena, lasing, *Solid-State Electron.* 40 (1996), 785~798.
- [39] Jeff Drucker and Sergio Chaparro, Diffusional narrowing of Ge on Si(100) coherent island quantum dot size distributions, *Appl. Phys. Lett.* 71 (1997), 614~616.
- [40] V. A. Shchukin, N. N. Ledentsov, P. S. Kop'ev, and D. Bimberg, Spontaneous Ordering of Arrays of Coherent Strained Islands, *Phys. Rev. Lett.* 75 (1995), 2968~2971.
- [41] M. Meixner and E. Schöll, V. A. Shchukin and D. Bimberg, Self-Assembled Quantum Dots: Crossover from Kinetically Controlled to Thermodynamically Limited Growth, *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001), 236101-1~4.
- [42] G. Medeiros-Ribeiro, A. M. Bratkovski, T. I. Kamins, D. A. Ohlberg, R. S. Williams, Shape Transition of Germanium Nanocrystals on a Silicon (001) Surface from Pyramids to Domes, *Science* 279 (1998), 353~355.
- [43] F. M. Ross, R. M. Tromp, and M. C. Reuter, Transition States Between Pyramids and Domes During Ge/Si Island Growth, *Science* 286 (1999), 1931~1934.
- [44] G. Jin, J. L. Liu, K. L. Wang, Temperature effect on the formation of uniform self-assembled Ge dots, *Appl. Phys. Lett.* 83 (2003), 2847~2849.
- [45] A. Rastelli, M. Kummer, and H. von Känel, Reversible Shape Evolution of Ge Islands on Si(001), *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001), 256101-1~4.
- [46] C. J. Huang, Y. H. Zuo, D. Z. Li, B. W. Cheng, L. P. Luo, J. Z. Yu, and Q. M. Wang, Shape evolution of Ge/Si(001) islands induced by strain-driven alloying, *Appl. Phys. Lett.* 78 (2001), 3881~3883.
- [47] A. Raab and G. Springholz, Controlling the size and density of self-assembled

- PbSe quantum dots by adjusting the substrate temperature and layer thickness, *Appl. Phys. Lett.* 81 (2002), 2457~2459.
- [48] István Daruka and Albert-László Barabási, Dislocation-Free Island Formation in Heteroepitaxial Growth: A Study at Equilibrium, *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997), 3708~3711.
- [49] Albert-László Barabási, Self-assembled island formation in heteroepitaxial growth, *Appl. Phys. Lett.* 70 (1997), 2565~2567.
- [50] S. A. Chaparro, Jeff Drucker, Y. Zhang, D. Chandrasekhar, M. R. McCartney, and David J. Smith, Strain-Driven Alloying in Ge/Si(100) Coherent Islands, *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999), 1199~1202.
- [51] Ph. Sonnet and P. C. Kelires, Monte Carlo studies of stress fields and intermixing in Ge/Si(100) quantum dots, *Phys. Rev. B* 66 (2002), 205307~205312.
- [52] Margaret Floyd and Yangting Zhang et al., Nanometer-scale composition measurements of Ge/Si(100) islands, *Appl. Phys. Lett.* 82 (2003), 1473~1475.
- [53] T. U. Schüllli, J. Stangl, Z. Zhong, R. T. Lechner, M. Sztucki, T. H. Metzger, and G. Bauer, Direct Determination of Strain and Composition Profiles in SiGe Islands by Anomalous X-Ray Diffraction at High Momentum Transfer, *Phys. Rev. Lett.* 90 (2003), 066105-1~4.
- [54] U. Denker, M. Stoffel, and O. G. Schmidt, Probing the Lateral Composition Profile of Self-Assembled Islands, *Phys. Rev. Lett.* 90 (2003), 196102-1~4.
- [55] H. Omi, D. J. Bottomley, and T. Ogino, Strain distribution control on the silicon wafer scale for advanced nanostructure fabrication, *Appl. Phys. Lett.* 80 (2002), 1073~1075.
- [56] H. Lee, J. A. Johnson, M. Y. He, J. S. Speck, and P. M. Petroff, Strain-engineered self-assembled semiconductor quantum dot lattices, *Appl. Phys. Lett.* 78 (2001), 105~107.
- [57] Zhenyang Zhong, A. Halilovic, M. Mühlberger, F. Schäffler, and G. Bauer, Ge island formation on stripe-patterned Si(001) substrates, *Appl. Phys. Lett.* 82 (2003), 445~447.
- [58] O. G. Schmidt, N. Y. Jin-Phillipp, C. Lange, U. Denker, and K. Eberl, R. Schreiner, H. Gräbeldinger, and H. Schweizer, Long-range ordered lines of self-assembled Ge islands on a flat Si (001) surface, *Appl. Phys. Lett.* 77 (2000),

4139~4141.

- [59] D. S. L. Mui, D. Leonard, L. A. Coldren, and P. M. Petroff, Surface migration induced self-aligned InAs islands grown by molecular beam epitaxy, *Appl. Phys. Lett.* 66 (1995), 1620~1622.
- [60] T. I. Kamins and R. Stanley Williams, Lithographic positioning of self-assembled Ge islands on Si(001), *Appl. Phys. Lett.* 71 (1997), 1201~1203.
- [61] G. Jin, J. L. Liu, S. G. Thomas, Y. H. Luo, and K. L. Wang, Bich-Yen Nguyen, Controlled arrangement of self-organized Ge islands on patterned Si (001) substrates, *Appl. Phys. Lett.* 75 (1999), 2752~2754.
- [62] Takeshi Kitajima, Bing Liu, and Stephen R. Leone, Two-dimensional periodic alignment of self-assembled Ge islands on patterned Si(001) surfaces, *Appl. Phys. Lett.* 80 (2002), 497~499.
- [63] M. Sugawara, *Self-Assembled InGaAs/GaAs Quantum Dots, Semiconductors and Semimetals*, Academic Press, New York, (1999), Vol. 60.
- [64] O. Fruchart, M. Klaua, J. Barthel, and J. Kirschner, Self-Organized Growth of Nanosized Vertical Magnetic Co Pillars on Au(111), *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999), 2769~2772.
- [65] G. L. Snider, A. O. Orlov, I. Amlani, X. Zuo, G. H. Bernstein, C. S. Lent, J. L. Merz, and W. Porod, Quantum-dot cellular automata: Review and recent experiments (invited), *J. Appl. Phys.* 85 (1999), 4283~4285.
- [66] E. Mateeva and P. Sutter, J. C. Bean, M. G. Lagally, Mechanism of organization of three-dimensional islands in SiGe/Si multilayers, *Appl. Phys. Lett.* 71 (1997), 3233~3235.
- [67] M. Stoffel, U. Denker, G. S. Kar, H. Sigg, and O. G. Schmidt, Extended wavelength region of self-assembled Ge/Si(001) islands capped with Si at different temperatures, *Appl. Phys. Lett.* 83 (2003), 2910~2912.
- [68] G. Capellini, M. De Seta, and F. Evangelisti, SiGe intermixing in Ge/Si(100) islands, *Appl. Phys. Lett.* 78 (2003), 303~305.
- [69] Toshio Mura, *Micromechanics of defects in solids*, Martinus Nijhoff Publishers, The Netherlands.
- [70] R. D. Mindlin and D. H. Cheng, Nuclei of strain in the semi-infinite solid, *J. Appl. Phys.* 21 (1950), 926~930.

- [71] R. D. Mindlin and D. H. Cheng, Thermoelastic stress in the semi-infinite solid, *J. Appl. Phys.* 21 (1950), 931~933.
- [72] Qianghua Xie, J. L. Brown, R. L. Jones, and J. E. Van Nostrand, K. D. Leedy, Growth of vertically self-organized InGaAs quantum dots with narrow inhomogeneous broadening, *Appl. Phys. Lett.* 76 (2000), 3082 ~3084.
- [73] Q. Xie, J.L. Brown and J.E. Van Nostrand, Cooperative nucleation and evolution in InGaAs quantum dots in multiply stacked structures, *Appl. Phys. Lett.* 78 (2001), 2491~2493.
- [74] M. Bayer, P. Hawrylak, K. Hinzer, S. Fafard, M. Korkusinski, Z. R. Wasilewski, O. Stern, and A. Forchel, Coupling and Entangling of Quantum States in Quantum Dot Molecules, *Science* 291 (2001), 451~453.
- [75] C. J. Huang, D. Z. Li, B. W. Cheng, J. Z. Yu, and Q. M. Wang, Oblique alignment of columns of self-organized Ge/Si(001) islands in multilayer structure, *Appl. Phys. Lett.* 77 (2000), 2852~2854.

攻读硕士学位期间已公开发表的论文

1. **Jianjun Zhang, Kaiwang Zhang, Jianxin Zhong, Local self-organization of islands in embedded nanodot systems, Applied Physics Letters 84 (2004), 1853~1855.**
2. **Jianjun Zhang, Kaiwang Zhang, Jianxin Zhong, Replication and Alignment of quantum dots in multilayer heteroepitaxial growth, Surface Science 551 (2004), L40-L46.**

致 谢

作者衷心感谢导师钟建新教授、张凯旺副教授三年来的悉心培养和教诲！导师渊博的学识、活跃的思维使我受益匪浅，严谨的治学态度和勤勉的敬业精神给我深刻的教育和启迪，民主平等的科学精神将深远地影响我今后的学习和工作。同时也十分感谢唐翌教授在学习和生活上给予的有益帮助！

感谢颜晓红教授、周益春教授、杨奇斌教授、郑学军教授、林建国教授及曹觉先博士、丁建文博士、龙志林博士、王登龙博士给予的关心与帮助！

感谢物理学院陈爱华老师、陈春先老师、石嵘恺老师、任志昂主任、郭正怀书记、胡本文书记在学习和生活上给予的教导、关心和帮助！

感谢物理学院所有老师给我提供良好的学习环境和生活环境，感谢物理学院所有师兄弟、师姐妹在我的生活、学习和工作中的友好关心和帮助。

最后，我衷心地感谢我的父母、妹妹和女友，你们的关爱、理解、支持和鼓励始终是我前进的动力。

张建军

2004年4月