

doi:10.3788/gzxb20134202.0186

不同生长环境下砷化镓纳米颗粒的应变场模拟

江子雄, 张求龙, 袁彩雷

(江西师范大学 物理与通信电子学院, 南昌 330022)

摘要:对于埋藏在薄膜材料中的纳米颗粒,在其生长过程中总是不可避免地伴随着应变场的产生,而这种应变场的分布能反映纳米颗粒的结构变化,纳米颗粒结构与它的物理性能有重要的关系.研究埋藏在不同薄膜材料中的纳米颗粒生长过程中的应变场分布对于调控纳米颗粒的物理性能有着重要的意义.本文利用有限元算法分别计算了埋藏在非晶氧化铝薄膜和非晶二氧化硅薄膜材料中的砷化镓纳米颗粒生长过程中的应变场分布.砷化镓纳米颗粒在以上两薄膜材料生长过程中都受到非均匀应变作用.对于埋藏在氧化铝薄膜中的砷化镓纳米颗粒,其生长过程中,纳米颗粒内部受到的应变大于纳米颗粒表面受到的应变;而对于埋藏在二氧化硅薄膜中的砷化镓纳米颗粒,纳米颗粒内部受到的应变小于纳米颗粒表面受到的应变.选择砷化镓纳米颗粒生长的薄膜材料可以调控纳米颗粒生长过程中的应变场分布,从而进一步调控纳米颗粒的晶格结构和形貌及其物理性能.

关键词:纳米颗粒;应变;有限元算法;薄膜

中图分类号:O43;O47

文献标识码:A

文章编号:1004-4213(2013)02-0186-5

Simulation of Strain Distribution of GaAs Nanoparticles with Growth in Different Environment

JIANG Zi-xiong, ZHANG Qiu-long, YUAN Cai-lei

(School of Physics, Communication and Electronics, Jiangxi Normal University, Nanchang 330022, China)

Abstract: The growth of nanoparticles embedded in a host matrix can lead to substantial strain. Strain can have much influence on the crystal growth and microstructure development of nanoparticles and the correlation of the physical properties of nanoparticles with their microstructures. To better understand and control the physical properties of GaAs nanoparticles, it is fundamentally necessary to study the strain distribution of nanoparticles embedded in different thin films. In this paper, the growth strain of GaAs nanoparticles embedded in Al_2O_3 and SiO_2 thin films were investigated. Finite element calculations clearly indicate that the GaAs nanoparticles incurs a net deviatoric strain in both amorphous Al_2O_3 and SiO_2 thin films. The compressive strain existing in the center of a GaAs nanoparticle embedded in Al_2O_3 thin film is stronger than that at the surface of the nanoparticle. In contrast, the compressive strain existing at the surface of a GaAs nanoparticle embedded in SiO_2 thin film is stronger than that in the center of the nanoparticle. It is possible to control the strain distribution of GaAs nanoparticles by embedding the GaAs nanoparticles in different thin films, which will further influence the microstructures and morphologies of GaAs nanoparticles. Strain engineering is an effective tool for tailoring the properties of GaAs nanoparticles.

Key words: Nanoparticles; Strain; Finite element calculations; Thin film

基金项目:国家自然科学基金(Nos. 11164008, 11004087)资助

第一作者:江子雄(1988-),男,硕士研究生,主要研究方向为纳米材料. Email:631925399@qq.com

导师(通讯作者):袁彩雷(1975-),男,教授,博士,主要研究方向为纳米材料. Email:clyuan@jxnu.edu.cn

收稿日期:2012-08-30;录用日期:2012-10-22

0 引言

将纳米颗粒埋嵌在薄膜材料中是当前一个热门研究方向. 对于镶嵌在薄膜材料中的纳米颗粒, 在纳米颗粒的生长过程中总是不可避免地伴随着应变场的产生^[1-2]. 通常, 埋嵌在薄膜材料中的纳米颗粒形成和生长机理如下: 在高温下, 当表面能足够大时, 新的晶核形成, 同时, 那些已经形成的纳米颗粒通过表面吸附原子而进一步长大, 从而导致在高温下纳米颗粒的尺寸变大^[3]. 然而, 在纳米颗粒成核和生长过程中由于纳米颗粒材料和薄膜母体材料的杨氏模量和泊松比的不同, 薄膜母体材料会对纳米颗粒施加应变的作用. 这种存在的应变对于纳米颗粒的晶格结构, 形貌和表面缺陷态有很大的影响^[4-5], 从而极大地影响其光学^[6]和电学^[7]性能. 因此, 调节埋嵌型纳米颗粒生长过程中的应变场有着非常重要的意义.

砷化镓可以用来作为发光材料. 另外砷化镓相比其它半导体材料具有如更高的饱和电子速率及更高的电子移动率特性. 这些特性使它被广泛用来制作像微波集成电路(例如单晶微波集成电路(MMIC))、红外线发光二极管、半导体激光器、太阳能电池等组件^[8]. 此外砷化镓纳米颗粒埋嵌在非晶薄膜母体材料中生长形成复合材料, 兼有纳米微粒与薄膜的双重特性. 表现出三阶非线性系数大、阈值电流密度低、响应速度快等许多独特的光学特性, 在光储存、光开关^[9]、光波导、光学计算机等光学非线性器件^[10]方面展示出越来越广泛的应用前景. 有不少研究报道过, 砷化镓纳米颗粒表面结构的改变导致砷化镓纳米颗粒的光学、电学性能的不同, 他们大多从量子尺寸观点^[11]和实验检测^[12-13]方法来研究. 很少有人从应变场角度来研究砷化镓纳米颗粒.

本文用有限元算法系统模拟了砷化镓纳米颗粒在氧化铝和二氧化硅非晶薄膜中生长过程受到的应变场分布, 研究发现砷化镓纳米颗粒在不同类型薄膜材料中受到的应变场分布有很大的区别, 并系统地分析了生长环境影响砷化镓纳米颗粒应变场分布的原因.

1 模拟

计算应变分布的方法主要有数值有限元法、原子模拟方法和解析连续力学方法. 原子模拟方法的计算量过于浩大, 目前仅限于小体系量子点. 解析连续力学方法中的积分仅适用于一些简单形状的夹杂. 与这两种方法相比有限元计算量子点的应变场更有效.

砷化镓纳米颗粒埋嵌在非晶薄膜中产生的应变场模型基于以下假设: 一个球形的各向同性的线弹性的纳米颗粒置于一个无限大的各向同性的线弹性的薄膜中, 纳米颗粒是埋嵌在非晶薄膜中的. 假设纳米颗粒被放在薄膜的一个有限大的空腔中, 由于周围薄膜材料的原子不能迅速的适应纳米颗粒在生长过程中的体积变化, 因而导致了纳米颗粒受到了周围薄膜材料的压缩应变^[14]. 在应变模拟过程中, 三种材料的杨氏模量 E 、泊松比 ν 、热膨胀系数 α 各向同性且不随温度变化. 所用参量如表 1 所示. 我们用有限元算法(ANSYS 软件)定性地模拟了二维的埋嵌在非晶氧化铝薄膜中与埋嵌在非晶二氧化硅薄膜中砷化镓纳米颗粒生长过程中的应变场强分布^[15-16]. 在有限元计算中, 假设球形的砷化镓纳米颗粒的位置在非晶薄膜的中心, 非晶薄膜无限大. 砷化镓纳米颗粒和非晶薄膜的交界处是埋嵌的.

表 1 应变模拟中所取参量

| Sample | Yang's moduli/Pa | Poisson's ratio |
|-------------------------|------------------------|-----------------|
| GaAs | 8.049×10^{10} | 0.312 |
| Al_2O_3 | 3.6×10^{11} | 0.24 |
| SiO_2 | 5.56×10^{10} | 0.16 |

图 1 是半径为 2.5 nm, 5 nm, 7.5 nm 的球形砷化镓纳米颗粒埋嵌在非晶氧化铝薄膜中的 X-Y 剖面的应变场分布图. 图 2 是半径为 2.5 nm, 5 nm, 7.5 nm 的球形砷化镓纳米颗粒埋嵌在非晶二氧化硅薄膜中的 X-Y 剖面的应变场分布图. 图 3 是半径为 2.5 nm, 5 nm, 7.5 nm 的球形砷化镓纳米颗粒埋嵌在非晶氧化铝薄膜中的 X-Y 剖面的应变强度图. 图 4 是半径为 2.5 nm, 5 nm, 7.5 nm 的球形砷化镓纳米颗粒埋嵌在非晶二氧化硅薄膜中的 X-Y 剖面的应变强度图. 显然砷化镓纳米颗粒受到周围非晶薄膜的压缩应变.

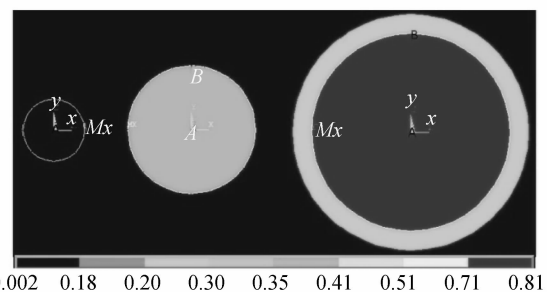


图 1 半径分别为 2.5 nm, 5 nm, 7.5 nm 的砷化镓纳米颗粒埋嵌在非晶氧化铝薄膜的 X-Y 剖面的应变场分布
Fig. 1 X-Y plane strain distribution of GaAs nanoparticle with the size of 2.5, 5 and 7.5 nm

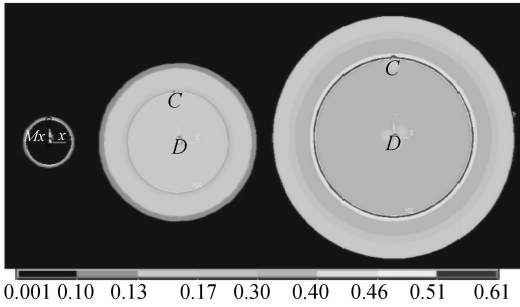


图2 半径分别为 2.5 nm, 5 nm, 7.5 nm 的砷化镓纳米颗粒埋嵌在非晶二氧化硅薄膜的 X-Y 剖面的应变场分布
Fig. 2 X-Y plane strain distribution of GaAs nanoparticle with the size of 2.5, 5, and 7.5 nm

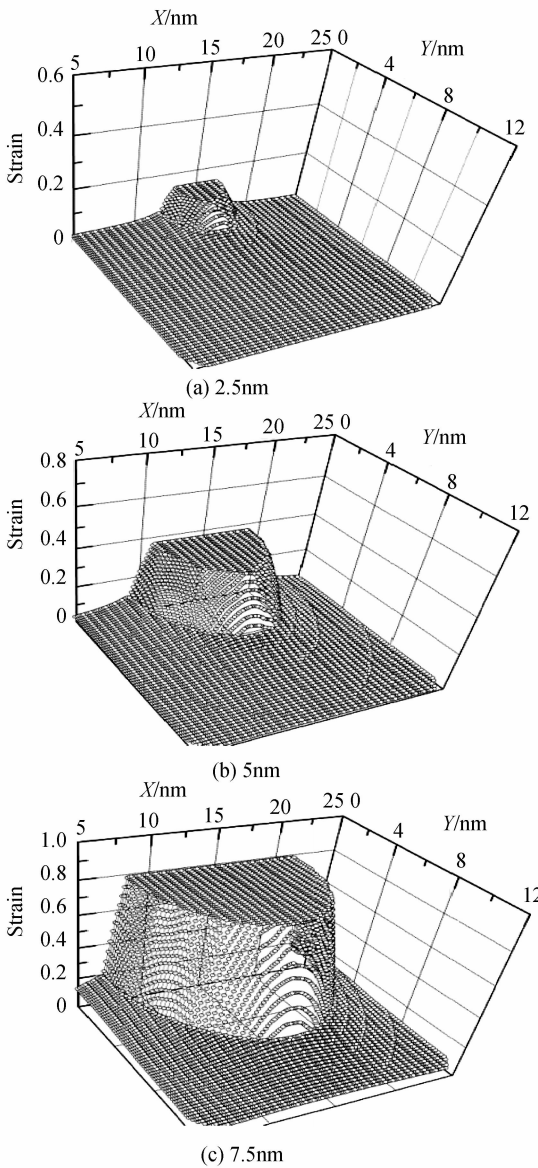


图3 砷化镓纳米颗粒在非晶氧化铝薄膜生长的 X-Y 剖面的应变强度图
Fig. 3 X-Y plane strain profile of GaAs nanoparticle with the size

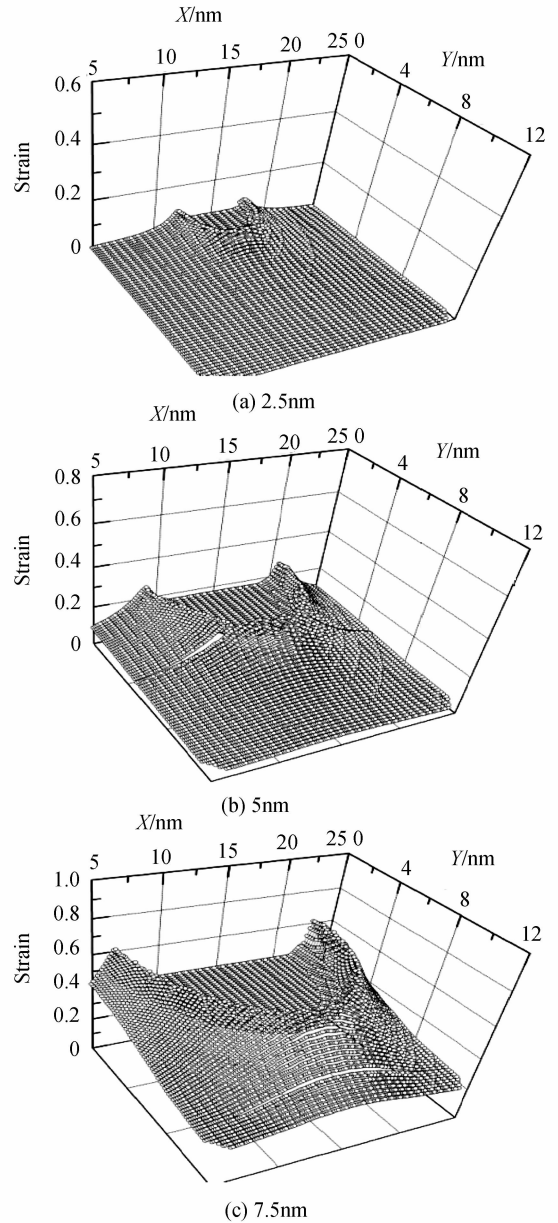


图4 砷化镓纳米颗粒在非晶二氧化硅薄膜生长的 X-Y 剖面的应变强度图
Fig. 4 X-Y plane strain profile of GaAs nanoparticle with the size

2 讨论

从图1和图3可以看出,砷化镓纳米颗粒在非晶氧化铝薄膜生长过程中受到非均匀偏应变作用,砷化镓纳米颗粒表面受到的应变小于砷化镓纳米颗粒内部受到的应变.从图2和图4可以看出,砷化镓纳米颗粒在非晶二氧化硅薄膜生长过程同样受到非均匀偏应变作用,但砷化镓纳米颗粒表面受到的应变大于砷化镓纳米颗粒内部受到应变作用.两种应变作用都随着砷化镓纳米颗粒长大逐渐增强.图5

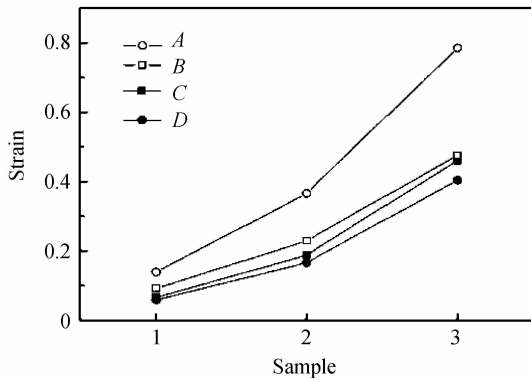


图5 对应于图1,图2中样品1(2.5 nm),2(5 nm),3(7.5 nm)的A,B,C,D点的应变变化曲线
Fig. 5 Strain intensity of the point A,B,C,D in the sample 1(2.5 nm),2(5 nm),3(7.5 nm), respectively

为对应于图1、2中样品1(2.5 nm),2(5 nm),3(7.5 nm)的A,B,C,D点的应变变化曲线,A点为埋嵌在氧化铝薄膜材料中砷化镓纳米颗粒的体心位置,B点为埋嵌在氧化铝薄膜材料中砷化镓纳米颗粒的表面位置,C点为埋嵌在二氧化硅薄膜材料中砷化镓纳米颗粒的表面位置,D点为埋嵌在二氧化硅薄膜材料中砷化镓纳米颗粒的体心位置.图5表明,砷化镓纳米颗粒在非晶氧化铝薄膜生长过程中,在半径为2.5 nm时砷化镓纳米颗粒体心受到的应变略大于砷化镓纳米颗粒表面受到的应变.在半径为5 nm、7.5 nm时砷化镓纳米颗粒整体受到的应变逐渐增大,砷化镓纳米颗粒体心受到的应变增加速度比砷化镓纳米颗粒表面受到的应变增加速度快,它们之间偏差随着砷化镓纳米颗粒长大越来越大.图5还表明,砷化镓纳米颗粒在非晶二氧化硅薄膜生长过程中,在半径为2.5 nm时砷化镓纳米颗粒体心受到的应变与砷化镓纳米颗粒表面受到的应变几乎一样,在半径为5 nm、7.5 nm时砷化镓纳米颗粒整体受到的应变同样逐渐增大,但砷化镓纳米颗粒体内部受到的应变增加速度比砷化镓纳米颗粒表面受到的应变增加速度慢,同样它们之间的偏差也随着砷化镓纳米颗粒长大逐渐增大.出现以上模拟图所对比出的结果,实际在模拟过程中取决于表1两薄膜母体材料的杨氏模量、泊松比的不同.在温度升高时,纳米颗粒膨胀,纳米晶会向周围生长,在生长过程中受到薄膜材料的挤压应变作用,杨氏模量大的薄膜材料导致纳米颗粒整体受到挤压作用强,纳米颗粒表面受到的应变小于纳米颗粒内部受到的应变;杨氏模量小的薄膜材料导致纳米颗粒整体受到的应变小,纳米颗粒表面受到的应变大于纳米颗粒内部受到的应变.另外随着纳米颗粒的长大,纳米颗粒整体受到的挤压作用越来越强,纳米颗粒内外受到的应变偏差也越来越明显.这种存在偏应

变对于纳米颗粒的晶格结构和形貌有较大的影响,从而极大地影响其物理性能.

3 结论

本文用有限元算法(ANSYS)软件定性地模拟出砷化镓纳米颗粒分别埋嵌在非晶氧化铝薄膜与非晶二氧化硅薄膜生长过程中的应变场分布,发现砷化镓纳米颗粒在氧化铝薄膜中生长过程中,砷化镓纳米颗粒表面受到的应变小于砷化镓纳米颗粒内部受到的应变;而砷化镓纳米颗粒在二氧化硅薄膜中生长过程中,砷化镓纳米颗粒表面受到的应变大于砷化镓纳米颗粒内部受到的应变;两种薄膜材料对砷化镓纳米颗粒整体应变作用都随着砷化镓纳米颗粒长大逐渐增强,同时纳米颗粒内外受到应变偏差也越来越明显;导致这两者的不同是由于两薄膜材料的杨氏模量与泊松比的不同,因此薄膜材料的不同对纳米颗粒生长具有不同的影响.根据以上分析,系统研究纳米颗粒周围薄膜材料对纳米颗粒生长过程所受的应变场分布规律,对有效调控其光学、电学性能具有重要的意义.

参考文献

- [1] WELLNER A, PAILLARD V, BONAFOS C, *et al.* Stress measurements of germanium nanocrystals embedded in silicon oxide[J]. *Journal of Applied Physics*, 2003, **94**(9): 5639-5642.
 - [2] CHEW H G, ZHENG F, CHOI W K, *et al.* Influence of reductant and germanium concentration on the growth and stress development of germanium nanocrystals in silicon oxide matrix[J]. *Nanotechnology*, 2007, **18**(6): 065302.
 - [3] YUAN C L, LEE P S, YE S L. Formation, photoluminescence and charge storage characteristics of Au nanocrystals embedded in amorphous Al_2O_3 matrix [J]. *Europhysics Letters*, 2007, **80**(4): 67003.
 - [4] YUAN C L, LIU Q, XU B. Strain-induced structural phase transition of Si nanoparticles [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2011, **115**(33): 16374-16377.
 - [5] YUAN C L, YE S L, XU B, *et al.* Strain induced tetragonal $SrTiO_3$ nanoparticles at room temperature [J]. *Applied Physics Letters*, 2012, **10**(7): 071909.
 - [6] YUAN C L, CAI H, LEE P S. Tuning photoluminescence of Ge/GeO₂ core/shell nanoparticles by strain[J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2009, **113**(46): 19863-19866.
 - [7] YUANC L, LEI W. Photoluminescence and charge storage characteristics of silica nanocrystals: the role of stress-induced interface defects[J]. *Applied Surface Science*, 2010, **256**(10): 3138-3141.
 - [8] USAMI N, AZUMA Y, UJIHARAT, *et al.* SiGe bulk crystal as a lattice-matched substrate to GaAs for solar cell applications[J]. *Applied Physics Letters*, 2000, **77**(22): 3565-3567.
 - [9] WANG Xin-mei, SHI Wei, Qu Guang-hui, *et al.* Analysis of carrier impact ionization in nonlinear photoconductive semiconductor switch[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, **37**(10): 1958-1961.
- 王馨梅, 施卫, 屈光辉, 等. 非线性光电导开关载流子碰撞电

- 离分析[J]. 光子学报, 2008, **37**(10): 1958-1961.
- [10] ZHANG Tong-yi, SHI Shun-xiang, ZHAO Wei, *et al.* The effect of negative differential mobility and impact ionization on nonlinearity of GaAs photoconductive semiconductor switch [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2002, **31**(4): 445-449.
张同意, 石顺祥, 赵卫, 等. 负微分迁移率和碰撞电离对 GaAs 光导开关非线性特性的影响[J]. 光子学报, 2002, **31**(4): 445-449.
- [11] DIAZ J G, BRYANT G W. Electronic and optical fine structure of GaAs nanocrystals: The role of d orbitals in a tight-binding approach[J]. *Physical Review B*, 2006, **73**(7): 075329P1-P9.
- [12] NAYAK J, SAHU SN, NOZALI S. GaAs nanocrystals: structure and vibrational properties [J]. *Applied Surface Science*, 2006, **252**(8): 2867-2874.
- [13] MAVI H S, SHUKLA A K, CHAUHAN B S, *et al.* Surface morphology and formation of GaAs nanocrystals by laser-induced etching: SEM, PL and Raman studies[J]. *Materials Science and Engineering B-solid State Materials for Advanced Technology*, 2004, **107**(2): 148-154.
- [14] ZHANG Qiu-long, JANG Zi-xiong, YUAN Cai-lei, *et al.* Strain distribution of Ni nanoparticles embedded in Al₂O₃ ultrathin film [J]. *Scientia Sinica Physica, Mechanica & Astronomica*, 2012, **42**(7): 711-715.
张求龙, 江子雄, 袁彩雷, 等. 埋嵌在超薄 Al₂O₃ 薄膜中的 Ni 纳米颗粒在生长过程中的应变场分布[J]. 中国科学: 物理学力学天文学, 2012, **42**(7): 711-715.
- [15] PEI Q X, LU C, WANG Y Y. Effect of elastic anisotropy on the elastic fields and vertical alignment of quantum dots[J]. *Journal of Applied Physics*, 2003, **93**(3): 1487-1492.
- [16] SHIN H, LEE W, YOO Y H. Comparison of strain fields in truncated and un-truncated quantum dots in stacked InAs/GaAs nanostructures with varying stacking periods [J]. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 2003, **15**(22): 3689-3699.

• 下期预告 •

适用于色敏解调的光位移传感器宽带 LED

王东辉, 刘林, 张超, 包艳, 郭昕

(中航工业西安飞行自动控制研究所, 西安 710065)

摘要: 为保证光位移传感器的工作性能, 输入光源在 500~800 nm 波长范围内需具有较高的光谱能量, 照明用 LED 波长在 700 nm 以上光谱能量陡降, 限制了传感器的工作范围. 针对照明用 LED 光谱能量不足的问题, 研制出适用于色敏解调光位移传感器的宽带 LED 光源. 首先利用单色仪对光位移传感器色敏元件 WS7.56 的性能进行了测试, 依据色敏解调结果提出了光位移传感器正常工作所需的输入光源的光谱能量阈值. 在照明用 LED 光谱特性基础上, 配比掺杂氮氧化物红色荧光粉提升 LED 红光及近红外光光谱能量, 得到了满足输入光源光谱能量阈值的宽带 LED. 最后, 对该宽带 LED 光位移传感器进行了位移测量实验, 实验结果较使用照明用 LED 光源有明显改善, 位移解调线性度良好. 本文研制的宽带 LED 光源体积小、效率高, 是光位移传感器较为理想的宽带光源.

关键词: 光位移传感器; 光谱能量; 宽带 LED; 红色荧光粉