

ВОЗНИКНОВЕНИЕ ДИСЛОКАЦИИ НЕСООТВЕТСТВИЯ НА ИНТЕРФЕЙСЕ ПОДЛОЖКИ И СЛОЯ ТВЕРДОГО РАСТВОРА КОНЕЧНОЙ ТОЛЩИНЫ

© Н.В.Фомин, Д.В.Шанцев

Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
(Поступила в Редакцию 12 января 1995 г.
В окончательной редакции 15 мая 1995 г.)

Проводится анализ напряженного состояния пленки твердого раствора конечной толщины в изотропном приближении. Показано, что если допустить пространственное перераспределение компонентов твердого раствора, необходимое для достижения термодинамического равновесия, то возникающее новое напряженное состояние описывается уравнениями теории упругости с перенормированными упругими модулями. Благодаря этому образование дислокаций несоответствия в твердых растворах происходит легче, чем в обычных материалах, т.е. при меньших рассогласованиях периодов пленки и подложки. Решена задача плоской теории упругости об энергии образования дислокации несоответствия в пленке конечной толщины при граничных условиях Френкеля-Конторовой (пограничные атомы помещены в косинус-потенциал, создаваемый подложкой). Рассчитана энергия образования дислокации несоответствия, и построены фазовые диаграммы в координатах рассогласования периодов δ и толщины пленки, а также δ и температуры. Обнаружено, что возможны ситуации, когда знак статического коэффициента Пуассона становится отрицательным, а образование дислокаций происходит при сколь угодно малом рассогласовании периодов в пленке и подложке.

В этой работе мы продолжим исследование условий нарушения однородности пленок твердых растворов из-за возникновения в них дислокаций несоответствия. Как известно, дислокации несоответствия возникают вследствие рассогласования кристаллических периодов пленки и подложки (происходит переход в несоизмеримую фазу). Чем толще пленка и чем слабее она взаимодействует с подложкой, тем при меньших рассогласованиях возникает несоизмеримая фаза. В твердых растворах, состоящих из атомов разных сортов и, следовательно, разных размеров, уменьшению величины критического рассогласования способствует также возможность локального изменения состава («атмосферы») вокруг дислокаций. Такое перераспределение состава происходит вследствие диффузии атомов в поле упругих напряжений дислокаций. Атомы большего размера стремятся занять области с меньшим сжатием. Для количественного описания перехода существует несколько моделей.

Для тонкой пленки, слабо взаимодействующей с подложкой, известна континуальная модель Френкеля-Конторовой [1], дающая для кри-

тического рассогласования выражение

$$\delta_{FK} = |a - a_{ad}|/a = (V_{\text{int}}/V)^{1/2}(a/h)^{1/2}, \quad (1)$$

где a_{ad} и a — периоды решеток пленки и подложки, V и V_{int} — энергии взаимодействия атомов пленки между собой и взаимодействия атомов пленки с атомами подложки, h — толщина пленки. Слабость взаимодействия и тонкость пленки определяются соответствующими условиями

$$V_{\text{int}}/V \ll 1, \quad h \ll aV/V_{\text{int}}. \quad (2)$$

Фактически, достаточно выполнения второго условия в (2), так как из него сразу следует первое, если учесть, что h всегда не меньше a . Для толстой пленки, определяемой условием

$$h \gg aV/V_{\text{int}}, \quad (3)$$

расчет по теории упругости дает оценку [2]

$$\delta_c \approx a/h \ln(h/a). \quad (4)$$

В [3] модель Френкеля–Конторовой обобщена на случай тонкой пленки из твердого раствора. При этом использовался термодинамический подход: система рассматривалась на временах, достаточных для окончания кинетических процессов, т.е. для диффузионного перемещения атомов в пленке на необходимые расстояния. Было обнаружено, что в твердых растворах благодаря наличию дополнительной степени свободы (возможности пространственной модуляции состава) условия возникновения дислокаций несоответствия облегчаются, и формула (1) преобразуется в

$$\delta_c = (V_*/V)^{1/2} \delta_{FK} < \delta_{FK}, \quad (5)$$

где $V_* = VV_{\text{ch}}/(V + V_{\text{ch}})$, а V_{ch} характеризует энергию пространственно неоднородного состояния твердого раствора.

Таким образом, нерассмотренным оставался случай толстой пленки твердого раствора. Настоящая работа восполняет этот пробел.

1. Термодинамически равновесное напряженное состояние в твердом растворе

В твердом растворе локальный период кристаллической решетки зависит от локальных концентраций входящих в него компонентов. Далее мы ограничимся рассмотрением только двойных (бинарных) и псевдобинарных растворов, при этом под концентрацией мы будем понимать долю узлов кристаллической решетки, занятых атомами одного из сортов. При деформации твердого раствора в нем возникают напряжения, под действием которых атомы кристаллической решетки начинают диффузионно перемещаться: более крупные атомы перемещаются в области меньшего сжатия, и наоборот. В результате по прошествии времени упругое состояние твердого раствора будет отличаться от начального. В такой ситуации можно говорить о перенормировке упругих модулей в твердом растворе. Однако использование

такой терминологии может привести к недоразумениям, поскольку это верно только для процессов, медленных по сравнению с временами достижения термодинамического равновесия. При температурах, далеких от температуры плавления, диффузионная подвижность атомов в идеальном кристалле невысока, так как для выхода атома в межузлие требуется преодолеть активационный барьер, и, следовательно, обсуждаемые времена могут быть экспоненциально большими. Понимаемое в таком смысле «смягчение» модулей упругости в пленках твердых растворов, способствующее, как будет показано, возникновению дислокаций, может рассматриваться как одна из причин, приводящих к их медленной деградации. Однако есть основания надеяться, что качественно механизм «смягчения» упругих модулей, облегчающий образование дефектов, проявляется и при самом выращивании пленок методом молекулярно-лучевой эпитаксии, когда в процессе кристаллизации атомы могут свободно диффундировать по поверхности (см. также обсуждение в [4]). Далее мы будем рассматривать систему после окончания кинетических процессов и, говоря об ее упругих свойствах, подразумевать статические свойства и соответственно статические модули упругости.

Найдем термодинамически равновесное состояние твердого раствора, соответствующее минимуму свободной энергии. При небольших отклонениях концентрации от среднего значения, а также в изотропном приближении для упругих модулей свободную энергию деформированного твердого раствора можно представить в виде [5]

$$F = \int \left[\mu (u_{ik} - 1/3 \delta_{ik} u_{ll})^2 + K/2 (u_{ll} - \nu)^2 + \frac{\beta \nu^2}{2} \right] dV, \quad (6)$$

где подразумевается интегрирование по всему пространству, занимаемому твердым раствором, по повторяющимся индексам — суммирование, и вводятся обозначения μ и K — модули сдвига и всестороннего сжатия, u_{ik} — тензор деформации,

$$\nu(\mathbf{r}) = \left[a(\mathbf{r})/a \right]^3 - 1 \quad (7)$$

— локальное относительное изменение объема твердого раствора, связанное с изменением состава. Если обозначить через a_A и a_B периоды кристаллических решеток из атомов сорта A и B соответственно, то период решетки твердого раствора с концентрацией c атомов сорта A есть

$$a = ca_A + (1 - c)a_B. \quad (8)$$

Допуская зависимость концентрации от координаты \mathbf{r} , приходим к (7), где $a(\mathbf{r})$ — зависящий от координаты период кристаллической решетки, а a — его среднее значение. Последний член в (6) — это избыточная энергия твердого раствора, связанная с неоднородным перераспределением его состава, а β в используемом нами гармоническом приближении дается выражением

$$\beta = f''_{ch}(c_0)/\eta^2, \quad (9)$$

где $f_{ch}(c)$ — плотность свободной химической энергии твердого раствора как функция концентрации [3], а $\eta = (1/a)(\partial a/\partial c)$. В приближении регулярного твердого раствора она записывается в виде [6]

$$f_{ch}(c) = \frac{1}{V_m} \left[c\mu_a + (1-c)\mu_b + \Omega c(1-c) + RT[(1-c)\ln(1-c) + c\ln c] \right], \quad (10)$$

где μ_a и μ_b — химические потенциалы атомов сорта A и B , Ω — параметр взаимодействия, R — универсальная газовая постоянная, T — температура, V_m — молярный объем. Из (10) следует оценка для параметра β

$$\beta = \frac{RT - 2\Omega c(1-c)}{c(1-c)V_m\eta^2}, \quad (11)$$

из которой видно, что он сильно зависит от температуры и может быть любого знака. Мы считаем β положительным, что соответствует устойчивости однородного состояния твердого раствора относительно спиновального распада (при отрицательных β устойчивость системы зависит от вида граничных условий в модели; так, при упругом сопряжении пленки с подложкой возможны при различных значениях упругих модулей как распад, так и однородное состояние [7], при постановке же граничных условий Френкеля–Конторовой модель, как было показано в [3], становится абсолютно неустойчивой).

Таким образом, в выражение для упругой энергии входят две функции: $u(\mathbf{r})$ и $\nu(\mathbf{r})$. Ограничимся случаем, когда средняя концентрация состава твердого раствора задана, что исключает диффузию атомов из рассматриваемого образца в подложку или обратно. Это условие может быть записано в виде $\overline{\nu(\mathbf{r})} = 0$ (здесь и далее черта означает усреднение по всему объему образца). При заданном поле деформаций u концентрация c , а следовательно и ν , согласно (7), (8), подстраивается так, чтобы минимизировать энергию. Произведем варьирование функционала энергии по $\nu(\mathbf{r})$ при условии $\overline{\nu(\mathbf{r})} = 0$. Это дает

$$\nu(\mathbf{r}) = \frac{K}{K + \beta} (u_{ll}(\mathbf{r}) - \overline{u_{ll}}). \quad (12)$$

Из этого выражения видно, что при заданном поле деформации $u_{ik}(\mathbf{r})$ перераспределение состава твердого раствора, отслеживающее u_{ll} , является энергетически выгодным. Подставляя (12) в (6), получим упругую энергию как функционал только от деформации u_{ik}

$$F = \int \left[\mu (u_{ik} - 1/3\delta_{ik}u_{ll})^2 + \frac{K_*}{2} u_{ll}^2 + \frac{K - K_*}{2} \overline{u_{ll}}^2 \right] dV, \quad (13)$$

где

$$K_* = \frac{K\beta}{K + \beta} < K. \quad (14)$$

В пределах больших β (когда, согласно (6), перераспределение состава крайне невыгодно) получается обычное выражение для упругой энергии (т.е. выражение (6) при $\nu \equiv 0$).

Легко видеть, что уравнение равновесия упругих изотропных твердых растворов, которое получается из (13) варьированием по u , содержит перенормированный в соответствии с (14) модуль всестороннего сжатия. Эта перенормировка является основным результатом обобщения статической теории упругости на твердые растворы. Заметим, что модуль сдвига при этом не меняется. Еще раз обратим внимание на то, что полученные нами результаты могут быть неприменимы к динамическим задачам теории упругости, например распространению звука, когда состав не успевает отслеживать деформацию, согласно формуле (12).

Вместо модулей μ и K часто используют модуль Юнга E и коэффициент Пуассона σ , которые связаны с μ и K простыми соотношениями. При переходе к твердому раствору они перенормируются следующим образом:

$$E_* = \frac{E}{1+p}, \quad \sigma_* = \frac{\sigma - p}{1+p}, \quad (15)$$

где $p = E/9\beta$. Следует отметить, что коэффициент Пуассона σ при достаточно малых β становится отрицательным и уменьшается в пределе до -1 . Величина σ , как известно, показывает отношение поперечного сжатия к продольному растяжению и всегда положительна. Описываемый в нашей модели твердый раствор может служить уникальным примером материала с отрицательным коэффициентом Пуассона. При локальном продольном растяжении он будет увеличивать локальную концентрацию «крупных» атомов, что приведет к поперечному растяжению. Поскольку обсуждаемые эффекты проявляются наиболее ярко при малых β , возникает вопрос: до каких пор в рассматриваемой модели его можно уменьшать? Разумеется, период твердого раствора $a(\mathbf{r})$ ограничен сверху и снизу собственными периодами a_A и a_B его компонентов, что, согласно (7), (12), ограничивает величину возможной деформации. Оценим границы применимости модели для интересующего нас случая дислокации в пленке толщиной h . Размер ядра дислокации в модели Френкеля-Конторовой определяется выражением

$$d \approx (Vha/V_{\text{int}})^{1/2}. \quad (16)$$

Поскольку характерная деформация в ядре есть $u' \approx a/d$, получаем оценку

$$\nu \approx \frac{K}{K+\beta} \left(V_{\text{int}}/V a/h \right)^{1/2} < \nu_{\text{max}} = |a_A - a_B|/a, \quad (17)$$

которая справедлива для тонких пленок $h < aV/V_{\text{int}}$. Для толстых пленок (17) переходит в

$$\frac{K}{K+\beta} V_{\text{int}}/V < |a_A - a_B|/a. \quad (18)$$

На самом деле для корректности гармонического приближения для химической энергии (член $\beta\nu^2/2$ в (6)) следует заменить в (17), (18) неравенства на более сильные, однако в качестве оценки эти выражения являются удовлетворительными.

Возвращаясь к полученному выражению для энергии, заметим также, что если представить тензор деформации как сумму его однородной и чисто неоднородной составляющих

$$u_{ik} = \overline{u_{ik}} + \tilde{u}_{ik}, \quad (19)$$

где $\tilde{u}_{ik} = (u_{ik} - \overline{u_{ik}})$, то упругая энергия (13) также запишется в виде суммы

$$F(u_{ik}) = F^0(\overline{u_{ik}}) + F_*(\tilde{u}_{ik}), \quad (20)$$

причем соответствующая однородной деформации энергия F^0 вычисляется по формулам классической теории упругости, а энергия неоднородной деформации F_* по тем же формулам, но с перенормированными коэффициентами.

2. Решение задачи о дислокациях несоответствия для полосы в плоской теории упругости

Для определения термодинамически равновесного напряженного состояния пленки твердого раствора на кристаллической подложке следует сравнить энергию однородной деформации пленки, находящейся в когерентном сопряжении с подложкой, и энергию системы при наличии решетки дислокаций несоответствия. Как известно, упругая энергия может быть выражена через значения тензора напряжений и смещений на поверхности [5]

$$F_{el} = \frac{1}{2} \int \sigma_{ik} u_k dS_i. \quad (21)$$

Ограничимся случаем абсолютно жесткой подложки. Тогда вклад в упругую энергию вносит только пленка, и интегрирование в (21) ведется по ее поверхности.

Обычно граничные условия в задачах о дислокациях несоответствия формулируются наложением связи между σ_{ik} и u_k на границе раздела [2]. Тогда для нахождения упругой энергии можно воспользоваться следующим методом: сначала путем решения уравнений теории упругости выразить u_k как функционал от σ_{ik} на поверхности, а затем, дополнив это соотношение граничными условиями, из двух имеющихся уравнений найти функции u_k и σ_{ik} и подставить их в выражение для энергии (21).

Предположим для простоты, что несоответствие периодов пленки и подложки существует только вдоль одного из направлений (ось x), а вдоль другой оси z' (мы используем здесь z' , чтобы отличать ее от комплексной переменной z) деформация предполагается однородной; ось y направлена перпендикулярно пленке.

В изотропном случае можно с помощью теории функций комплексного переменного решить задачу о нахождении тензора деформации в пленке толщиной h при заданных напряжениях на границе раздела. В плоских задачах теории упругости тензоры напряжений и деформаций могут быть выражены через две аналитические функции. В решаемой

нами задаче удобно следующее представление для комплексных смещений $U = u_y + iu_x$ и тензора напряжений $G = \sigma_{yy} + i\sigma_{xy}$ на границе ($y = 0$) [8]:

$$U(z) = \frac{1}{2\mu} \left[\kappa\varphi(z) - z\overline{\varphi'(z)} - \overline{\psi(z)} \right], \quad (22)$$

где κ — константа, определяемая условиями, наложенными на смещения в направлении z' . Так, в обчной плоской теории упругости (ПТУ) рассматривается $u_z = 0$, и при этом

$$\kappa = \frac{3K + 7\mu}{3K + \mu}. \quad (23)$$

В так называемом обобщенном плоском напряженном состоянии (ОПНС) [8], где $\sigma_{zz} = 0$,

$$\kappa = \frac{24\mu - K}{9K}. \quad (24)$$

Мы ограничимся двумя этими случаями. Граничные условия выражаются через введенные комплексные функции следующим образом:

$$f(x) = \varphi(x) + x\overline{\varphi'(x)} + \overline{\psi(x)}, \quad (25)$$

где

$$f(x) = i \int_0^x G(x_1) dx_1. \quad (26)$$

Переведем конформным отображением $w = \exp(\pi z/h)$ полосу $0 < y < h$ в верхнюю полуплоскость, при этом нижний край полосы переходит в $[0, +\infty]$, а верхний — в $[-\infty, 0]$. Для полуплоскости решение непосредственно определяется интегралом Коши [8,9]

$$\varphi(w) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(v)dv}{v-w}, \quad (27)$$

тогда по формуле Сохоцкого предельные граничные значения суть

$$\varphi_+(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x')dx'}{(x'-x)} + \frac{1}{2}f(x), \quad (28)$$

где интеграл понимается в смысле главного значения. Возвращаясь к старым переменным, имеем

$$U(x) = \frac{\kappa + 1}{4\mu hi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(s)ds}{1 - \exp[\pi(s-x)/h]} + \frac{\kappa - 1}{2}f(x). \quad (29)$$

В этой формуле интегрирование ведется только по нижней границе полосы ($-\infty < x < +\infty, y = 0$), так как верхняя граница ($-\infty < x < +\infty,$

$y = h$) полагается свободной ($G \equiv 0$). Далее дифференцируем по x и используем определение $f' = iG$

$$U'(x) = \frac{\kappa + 1}{4\mu h} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{G(s)ds}{1 - \exp[\pi(s-x)/h]} + \frac{\kappa - 1}{2} iG(x). \quad (30)$$

Таким образом, формула (30) связывает смещения и напряжения на границе пленки твердого раствора (для твердого раствора модуль всестороннего сжатия K в выражениях для κ (23), (24) следует заменить на K' , согласно (14)).

Рассмотрим теперь граничные условия, используемые в модели Френкеля–Конторовой, а именно будем считать, что атомы на границе раздела помещены в косинус-потенциал, создаваемый подложкой, так что энергия связи пленки с подложкой определяется выражением

$$F_b = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mu_0 a^2}{(2\pi)^2} \left(1 - \cos \frac{2\pi u_x(x)}{a} \right) dx, \quad (31)$$

где $\delta = (a_{ad} - a)/a$ — рассогласование кристаллических периодов в пленке и подложке, а величина μ_0 характеризует силу связи пленки с подложкой [10]. Дифференцируя (31) по u , получаем граничные условия на нижней поверхности ($y = 0$)

$$\sigma_{xy} = \frac{\partial F_b}{\partial u_x} = \frac{\mu_0 a}{2\pi} \sin \frac{2\pi u_x}{a}. \quad (32)$$

Согласно (31), мы не учитываем нормальных к границе сил со стороны подложки: $\sigma_{yy}(y = 0) = 0$. Обратим внимание на то, что, записав энергию связи в виде (31), мы стали отсчитывать смещения атомов пленки относительно положений соответствующих атомов подложки. При этом первоначальные смещения в направлении x , отсчитанные от положений атомов пленки в недеформированном состоянии, изменились на δx . Очевидно, произведенная линейная замена переменных (соответствующая так называемому «жесткому смещению» [9]) никак не сказывается на уравнениях равновесия теории упругости, содержащих лишь вторые производные от смещений по координатам. Однако перед вычислением энергии по формуле (21) следует, конечно, вернуться к старым переменным.

Подставляя σ_{xy} , выраженное через u_x с помощью граничных условий (32), в уравнение (30), получаем интегродифференциальное уравнение для x -компоненты вектора смещения на границе с подложкой ($y = 0$)

$$u'_x(x) = \frac{1}{8\pi} \frac{a}{h} \frac{\mu_0}{\mu} (\kappa + 1) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin[2\pi u_x(s)/a] ds}{1 - \exp[\pi(s-x)/h]}. \quad (33)$$

3. Энергия сверхрешетки из дислокаций несоответствия

При выбранной нами системе отсчета смещений атомов в пленке выражение для упругой энергии (20) следует переписать следующим образом:

$$F(u_{ik}) = F^0(\overline{u_{ik}} + \delta\delta_{xi}\delta_{xk}) + F_*(u_{ik}), \quad (34)$$

где

$$F^0(u_{ik}) = \int \left[\mu(u_{ik} - 1/3\delta_{ik}u_{ll})^2 + \frac{K}{2}u_{ll}^2 \right] dV, \quad (35)$$

$$F_*(u_{ik}) = \int \left[\mu(u_{ik} - 1/3\delta_{ik}u_{ll})^2 + \frac{K_*}{2}u_{ll}^2 \right] dV \quad (36)$$

— функционалы энергии с неперенормированным и перенормированным модулем K соответственно. При вычислении (36) можно воспользоваться формулой (21), которая совместно с (32) приводит к

$$F_* = \frac{1}{2} \frac{\mu_0 a}{2\pi} \int u_x \sin \frac{2\pi u_x}{a} dx. \quad (37)$$

Энергия F^0 , отвечающая однородной деформации, может быть переписана как функция концентрации дислокаций. Действительно, $\overline{u_{xx}} = a/l$, где l — расстояние между дислокациями (период сверхрешетки). Подставляя $\overline{u_{xx}}$ и выраженные через него $\overline{u_{yy}}$ и $\overline{u_{zz}}$ в (35), находим

$$F_* = - \frac{8\mu(\delta - a/l)}{1 + \kappa} hz, \quad (38)$$

где κ определяется формулами (23), (24) для случаев ПТУ и ОПНС соответственно. Полное изменение энергии системы при появлении в псевдоморфной пленке решетки дислокаций есть

$$F_{\text{dis}} = F_b + F^0 + F_* = \frac{\mu_0 a^2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 - \cos \frac{2\pi u_x(x)}{a} \right) dx + \frac{\mu_0 a}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} u_x(x) \sin \frac{2\pi u_x(x)}{a} dx - \frac{8\mu(\delta - a/l)}{1 + \kappa} ha. \quad (39)$$

Слагаемые в этой формуле можно трактовать следующим образом: F_* , ($F_* < 0$) — выигрыш в энергии за счет частичной компенсации дислокациями однородного растяжения (или сжатия) пленки, F_b — проигрыш за счет нарушения когерентности на границе, а F^0 — проигрыш за счет упругих полей от дислокаций в объеме пленки.

4. Результаты

Чтобы определить энергию системы с дислокациями, необходимо из уравнения (33) найти функцию $u_x(x)$ и подставить ее в выражение (39). Ограничимся нахождением критической точки перехода в несоответствующую структуру. Критическое рассогласование δ_c определяется из условия

$$F_{\text{dis}}(\delta_c) = 0 \quad (40)$$

при l , равном бесконечности.

Будем искать решение уравнения (33) в виде одиночной дислокации: $u_x(-\infty) = 0$, $u_x(+\infty) = a$. Для двух предельных случаев решение может быть записано в аналитической форме. При $h \rightarrow 0$ (33) переходит в уравнение Синус-Гордона, возникающее в модели Френкеля-Конторовой. При $h \rightarrow \infty$ уравнению (33) удовлетворяет функция

$$u_x(x) = a/2 + (a/\pi) \operatorname{arctg}(x/d), \quad d = \mu/2\mu_0(1 - \sigma), \quad (41)$$

которая совпадает с решением интегрального уравнения Пайерлса-Набарро для краевой дислокации в бесконечном кристалле [11] только с другой (большей) полушириной дислокации. Та же функция (41) была получена и ван дер Мерве [10] в пределе $h \rightarrow \infty$, но принципиально иным методом. Форма дислокации для промежуточных h , найденная путем численного решения уравнения (33), показана на рис. 1. Основная тенденция, которая там прослеживается, — увеличение эффективного размера дислокации с ростом толщины пленки. Если при малых h поле одиночной дислокации локализовано (модель Френкеля-Конторовой), то по мере увеличения толщины все больший вклад вносят степенные законы спада напряжений, присущие обычной краевой дислокации в трехмерном кристалле.

Проанализируем уравнение (33). Кроме толщины слоя h эффективный размер дислокации также зависит от предынтегрального множителя. Усиление связи пленки с подложкой приводит к сужению дислокации. Когда ее размер станет порядка a , мы выйдем за пределы применимости теории упругости. Поэтому предложенный подход формально оправдан лишь для случая слабой связи ($\mu_0/\mu \ll 1$) пленки с

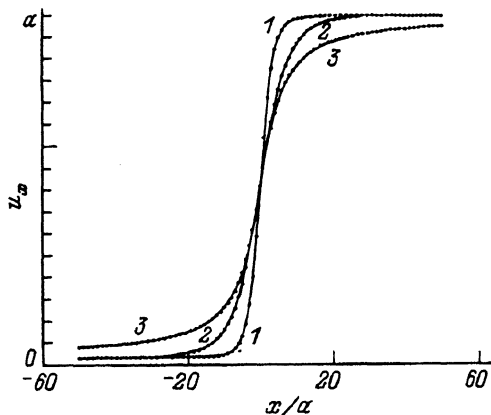


Рис. 1. Форма дислокации несоответствия для пленок различной толщины.

По оси y отложено продольное смещение атомов адсорбата, находящихся непосредственно на границе раздела с подложкой относительно положений ее атомов. Кривая 1 соответствует модели Френкеля-Конторовой ($h = a$), кривая 3 описывается формулой (41) ($h = \infty$), а кривая 2 (для $h = 5a$) — результат численного расчета в рамках предложенной модели ((33) при $\mu/\mu_0 = 2.5$). Точки соответствуют положению отдельных атомов.

подложкой. Однако, даже если это условие строго не выполняется, континуальное рассмотрение весьма удобно, так как обладает большой наглядностью и сохраняет все качественные особенности задачи.

Рассмотрим теперь эффект, связанный с учетом свойств твердого раствора. Упругие модули входят в (33) только через множитель $(\kappa + 1)$. В твердом растворе модуль всестороннего сжатия K перенормируется в соответствии с (14), причем при $\beta \rightarrow 0$ имеем $K \rightarrow 0$. Из (23), (24) видно, что в твердом растворе κ увеличивается, причем для ПТУ

$$\kappa \rightarrow 7, \quad \beta \rightarrow 0,$$

а для ОПНС

$$\kappa \rightarrow \infty, \quad \beta \rightarrow 0. \quad (42)$$

Таким образом, в твердом растворе уменьшаются эффективный размер дислокации и связанная с ней энергия, что качественно совпадает с результатами, полученными в рамках модели Френкеля-Конторовой [3]. В то же время из (42) видно, что сколь угодно малые δ_c , которые возникали в одномерной модели, теперь получаются только в рамках ОПНС. Причины этого легко понять. Новая степень свободы, которую дает твердый раствор, — способность перераспределять «крупные» и «мелкие» атомы. В ПТУ такое перераспределение затруднено. Действительно, в постановке ПТУ задаются нулевые смещения по оси z' , т.е. во всех точках материала по оси z' фиксируется один и тот же период. Поэтому любое локальное изменение состава и, следовательно, периода будет связано с избыточным напряжением. В то же время ОПНС представляет собой совершенно противоположный случай: полную свободу движения в направлении z' . Отсюда понятно, что здесь нет ограничений на перераспределение состава, и как следствие здесь получаются меньшие δ_c .

В общей сложности в задаче присутствуют четыре независимых параметра: толщина пленки h , рассогласование периодов δ , параметр связи с подложкой μ/μ_0 и температура T , которая определяет параметр β в соответствии с (11). Наиболее информативными являются критические линии в координатах рассогласование — толщина (критические линии разделяют области параметров, соответствующие соизмеримой и несоизмеримой фазе). С одной стороны, они дают величину критического рассогласования периодов при заданной толщине пленки; с другой стороны, при известном рассогласовании они показывают критическую толщину, до которой должен продолжаться псевдоморфный рост (рис. 2). Заметим, что метод, который применялся в данной работе для расчета кривых $\delta_c(h)$, существенно отличается от использованного в [12].

Вычисления показали, что при малых толщинах ($h < 5a$) $\delta_c(h)$ с хорошей точностью пропорциональна $h^{-1/2}$. Этот результат можно получить и в модели Френкеля-Конторовой. Действительно, если h настолько мало, что деформация в нормальном к пленке направлении однородна, то упругая константа для цепочки атомов V пропорциональна толщине, а $\delta_c \propto V^{-1/2}$. При больших толщинах зависимость δ_c от h приближается к обратной пропорциональности, что согласуется с (4).

На рис. 2, *a, b* показаны критические линии $\delta_c(h)$ для ПТУ и ОПНС соответственно для твердого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при трех различных

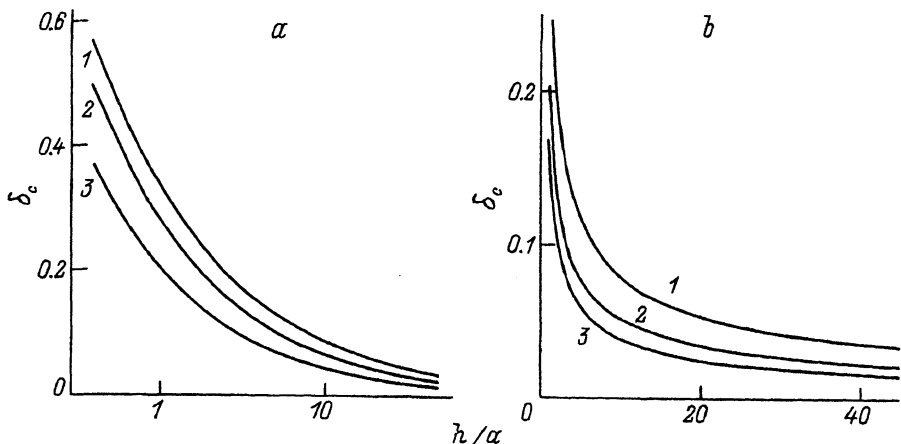
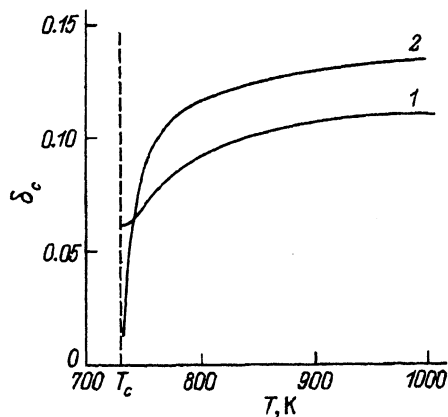


Рис. 2. Критические линии в координатах рассогласование-толщина. *a* — ОПНС, *b* — ПТУ для твердого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ при различных температурах. T (K): 1 — 1000, 2 — 789, 3 — 743. При расчетах использовались следующие значения параметров: $\Omega = 2.9$ kcal/mol, $\eta = 0.069$ [13], $x = 0.5$.

Рис. 3. Зависимости критического рассогласования от температуры для твердого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. 1 — ПТУ, 2 — ОПНС, T_c — температура спиноподобного распада твердого раствора. Полученные результаты применимы только при $T > T_c$. При $T \rightarrow T_c$ в случае ПТУ критическое рассогласование выходит на некоторое постоянное значение, а в случае ОПНС можно получить бесконечно малые δ_c .



температурах. При снижении температуры уменьшается параметр β (см. (11)), и, следовательно, облегчается пространственное перераспределение состава. При этом облегчаются и условия возникновения дислокаций несоответствия: критическая линия $\delta_c(h)$ смещается вниз. Необходимые для расчета параметры раствора взяты из работы [13].

На рис. 3 приведены зависимости критического рассогласования периодов от температуры $\delta_c(T)$ для пленки твердого раствора $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ толщиной в пять монослоев ($h = 5a$). В работе предполагалось, что $\beta > 0$, поэтому мы рассматриваем только температуры $T > T_c = \Omega/2R$, где T_c — температура спиноподобного распада раствора. В случае ОПНС критическое рассогласование может оказаться сколь угодно малым при T , достаточно близких к T_c , а в ПТУ при $T \rightarrow T_c$ оно выходит на константу (см. (42)). Заметим также, что значительные изменения δ_c происходят лишь в диапазоне нескольких десятков градусов в окрестности T_c .

Таким образом, мы проанализировали напряженное состояние пленки твердого раствора конечной толщины в изотропном прибли-

жении. Было показано, что если допустить пространственное перераспределение компонентов твердого раствора, необходимое для достижения термодинамического равновесия, то возникающее новое напряженное состояние описывается уравнениями теории упругости с перенормированными упругими модулями. В частности, происходит уменьшение модуля всестороннего сжатия и коэффициента Пуассона, причем последний может становиться отрицательным (при $\beta \rightarrow 0$, согласно (15), $\sigma \rightarrow -1$). Показано, что этот эффект облегчает образование дислокаций несоответствия в пленке твердого раствора, выращенной на кристаллической подложке.

Принципиально, что для установления такого напряженного состояния необходимо перемещение значительного количества вещества на большие расстояния в кристаллической решетке. При не очень высоких температурах этот процесс растягивается на экспоненциально большие времена, и поэтому рассмотренный механизм может быть ответствен за медленную деградацию пленок. Тем не менее есть основания надеяться, что качественно проведенный анализ правильно отмечает повышенную тенденцию твердых растворов к дефектообразованию и может описывать также термодинамически неравновесный процесс роста пленок, когда существует большая свобода для диффузии атомов в тонком приповерхностном слое.

В работе решена задача теории упругости для дислокации несоответствия в пленке конечной толщины при граничных условиях в виде косинус-потенциала. Рассчитана энергия образования дислокации несоответствия, и построены зависимости критического рассогласования периодов от толщины пленки и от температуры. Показано, что образование дислокаций происходит при сколь угодно малом рассогласовании периодов в пленке и подложке, если температура роста достаточно близка к температуре спинодального распада твердого раствора.

Авторы выражают благодарность Р.А.Сурису, В.А.Шукину и В.Г.Малышкину за полезные дискуссии.

Работа поддержана Фондом фундаментальных исследований России (грант номер 93023199).

Список литературы

- [1] Френкель Я.И., Конторова А.А. ЖЭТФ 8, 1, 89 (1938).
- [2] Тхорик Ю.А., Хазан Л.С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев (1983). 304 с.
- [3] Фомин Н.В. ФТТ 36, 5, 1379 (1994).
- [4] Малышкин В.Г., Шукин В.А. ФТП 27, 11, 1931 (1993).
- [5] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. М. (1987). Т. VII. 248 с.
- [6] Pegem M., Panish M.B. J. Phys. Chem. Sol. 35, 409 (1974).
- [7] Ipatova I.P., Malyshkin V.G., Shchukin V.A. J. Appl. Phys. 74, 12, 7198 (1993).
- [8] Мухелишвили Н.И. Некоторые основные задачи теории упругости. М. (1966). 707 с.
- [9] Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. М. (1965). 716 с.
- [10] Van der Merwe J.H. Proc. Phys. Soc. Lond. A63, 616 (1950).
- [11] Bullough R., Tewary V.K. In: Dislocations in solids / Ed. F.R.N.Nabarro (1979). V. 2. P. 1-67.
- [12] Van der Merwe J.H. J. Appl. Phys. 34, 1, 117 (1963).
- [13] Glas F. J. Appl. Phys. 62, 8, 3201 (1987).