

УДК 53.043 : 539.219.2

© 1990

СОСТОЯНИЯ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА В ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ ГЕТЕРОСИСТЕМАХ

М. Ю. Гуткин, А. Е. Романов

Предложен энергетический подход к определению состояния дефектной структуры границ раздела в тонкопленочных гетеросистемах. Рассмотрена модель гетеросистемы в виде тонкой пленки и полубесконечной подложки с конечным рядом дислокаций несоответствия (ДН) на границе между ними. Энергетический критерий, основанный на анализе зависимости плотности полной энергии такой системы от числа ДН в ряду, предсказывает существование четырех основных режимов заполнения границ дислокациями: 1) когерентная граница без ДН, 2) граница с отдельными, случайно расположенными ДН, 3) граница со скоплениями ДН, 4) граница, равномерно заполненная ДН, и позволяет определить критические параметры системы, разделяющие эти состояния.

Дефектная структура границ раздела в тонкопленочных гетеросистемах обычно представляет собой сетку дислокаций несоответствия (ДН), образующихся при релаксации упругих напряжений несоответствия на стадии получения гетеросистемы [1-3]. Степень воздействия ДН на протекающие в системе процессы должна определяться характером их распределения по границе, которое может быть как однородным, так и неоднородным. В первом случае ДН равномерно заполняют всю плоскость границы, во втором дефектная структура границы формируется в виде отдельных, достаточно мощных скоплений ДН, разделенных свободными от дефектов участками.

Скопления или группы ДН неоднократно наблюдались экспериментально [4-7], а их конфигурация вдоль границы раздела двух полубесконечных фаз исследовались теоретически [8]. Однако до сих пор нет полной ясности в причинах образования таких скоплений, поскольку, казалось бы, с энергетической точки зрения такое распределение ДН значительно менее выгодно, чем однородное. Как правило, появление неоднородностей в распределении ДН объясняют либо неравномерным распределением их источников, либо размножением ДН, происходящим по известному механизму Хагена—Струнка [2, 3]. Но, как уже отмечалось [9], с одной стороны, при благоприятных условиях (наличии подходящих плоскостей скольжения) для заполнения гетерограницы дислокациями достаточно ограниченного числа источников, а с другой стороны, при таких объяснениях непонятно, как неравномерное распределение источников и размножение ДН приводят к довольно равномерному распределению самих скоплений [7]. Кроме того, образование скоплений ДН обуславливалось лишь качественно, не были определены условия реализации однородного или неоднородного состояния дислокационной структуры.

Поискам ответов на поставленные вопросы была посвящена работа [9], в которой использовались представления о коллективных эффектах в системе ДН, выражающихся в сильном междислокационном взаимодействии ДН и в их обратном, запирающем, действии на источники. Строгий учет этих эффектов, а также учет влияния свободной поверхности на упругие поля скоплений ДН позволили получить динамический критерий обра-

зования скоплений ДН и обосновать периодичность их расположения. Однако рассмотренная в [9] модель носила несколько ограниченный характер, поскольку в ней учитывались только поверхностные источники.

В данной работе приведен более общий энергетический подход к определению состояния дефектной структуры гетерограницы, образованной ДН. Предлагаемая здесь модель предполагает два часто реализуемых на практике обстоятельства. Во-первых, считается, что зарождение ДН не может происходить одновременно по всей площади границы, а начинается вблизи существующих источников. Во-вторых, не допускается скольжение ДН вдоль границы раздела, например, из кристаллографических соображений. Это означает, что сформировавшееся скопление или группа ДН не может «разбежаться», т. е. расстояния между ДН в скоплении будут фиксированными. Наличие такого запрета приводит к ситуации, принципиально отличной от известных в теории двумерных кристаллов фазовых переходов второго рода между соизмеримой и несоизмеримой фазами [10, 11]. Наконец, для облегчения расчетов будем считать, что упругие модули пленки и подложки одинаковы, толщина подложки бесконечна, а ДН локализованы в плоскости границы. Предположим также, что несоответствие f одномерное, дилатационное.

Рассмотрим границу раздела тонкой пленки и подложки с расположенными вблизи нее дислокационными источниками, достаточно удаленными по сравнению с толщиной пленки друг от друга. Зародившиеся на каждом из таких источников ДН образуют скопления, в среднем содержащие N дислокаций. Поскольку расстояния между скоплениями велики, то в условиях сильной экранировки упругих полей ДН свободной поверхностью пленки можно считать, что скопления не взаимодействуют между собой. Это позволяет свести задачу к исследованию условий формирования одного отдельного скопления.

В качестве расчетной модели скопления ДН возьмем ряд из N краевых дислокаций, линии и векторы Бюргера которых лежат в плоскости границы раздела, параллельной свободной поверхности полубесконечной упругой среды (рис. 1). Глубина залегания ДН h соответствует толщине пленки, расстояние между ДН $l = b/f$, где b — вектор Бюргера дислокации.

Плотность полной энергии такой системы на единицу длины дислокации

$$w = w^f + w^n - A^d, \quad (1)$$

где w^f — плотность упругой энергии исходного несоответствия, $w^n = Gb^2N/[4\pi(1-\nu)]$ — плотность энергии ядер ДН; A^d — удельная работа по зарождению ряда в однородном поле несоответствия σ_{ij}^f и в поле самого дислокационного ряда σ_{ij}^d

$$A^d = Nb \int_0^{h-b} \sigma_{yy}^f dx + \sum_{m=0}^{N-1} \left[\frac{b}{2} \int_0^{h-b} \sigma_{yy}^d dx \right]. \quad (2)$$

Входящие в выражение (2) компоненты указанных полей имеют вид

$$\sigma_{yy}^f = 2Gf(1-\nu)/(1-2\nu), \quad (3)$$

$$\sigma_{yy}^d = \frac{Gb}{4\pi(1-\nu)} \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ \frac{6(x-h)}{t^2 + (x-h)^2} - \frac{4(x-h)^3}{[t^2 + (x-h)^2]^2} - \frac{6x+10h}{t^2 + (x+h)^2} + \frac{4(x+h)(x^2+10xh+3h^2)}{[t^2 + (x+h)^2]^2} - \frac{32xh(x+h)^3}{[t^2 + (x+h)^2]^3} \right\}, \quad (4)$$

где G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, $t = (m-n)l$. Отметим, что выражение (4) представляет собой упругое поле, полученное суммированием экранированных свободной поверхностью полей [12] отдельных ДН. Выражение под знаком суммы — это поле n -й дислокации, вычисленное в плоскости $y = ml$, по которой вводится m -я дислокация.

Подставляя выражение (2) с учетом (3), (4) в формулу (1), получаем

$$w = wf + \frac{Gb^2N}{4\pi(1-\nu)} - 2G \frac{1-\nu}{1-2\nu} fbN(h-b) + \frac{Gb^2}{8\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \left[\frac{2t^2}{t^2+b^2} - 2 \frac{t^4 + 2t^2h^2 + 8h^4}{(t^2+4h^2)^2} + \ln \frac{t^2+4h^2}{t^2+b^2} \right]. \quad (5)$$

Сравним это энергетическое состояние системы с состоянием $w = w^f$, отвечающим чисто упругой, без введения ДН, аккомодации несоответствия. На рис. 2 показана полученная численно зависимость разности $\Delta w = w - w^f$ от числа N дислокаций в ряду при $f = 10^{-3}$ и различных толщинах пленки h . Ось абсцисс $\Delta w = 0$ соответствует чисто упругой аккомодации. Кривая 1 отвечает случаю, когда образование ДН еще энергетически невыгодно ($\Delta w > 0$); кривые 2-4 соответствуют зарождению дислокационных рядов,

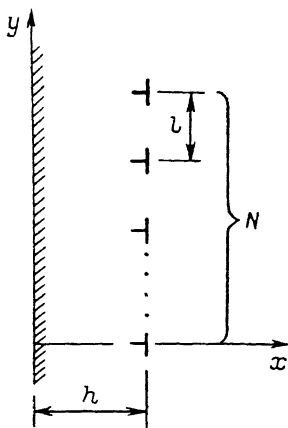


Рис. 1. Дискретный ряд из N краевых дислокаций на границе раздела пленки и подложки.

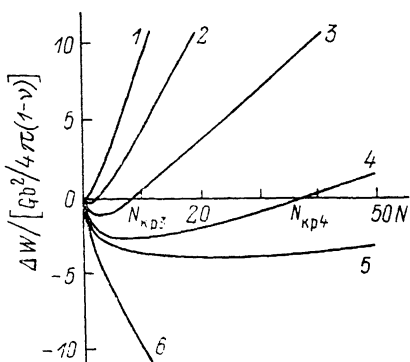


Рис. 2. Зависимость разности Δw плотностей полной энергии системы и упругой энергии исходного несоответствия от числа N дислокаций несоответствия в ряду при $f = 10^{-3}$ и различных значениях толщины пленки.

h : 1 — 205b, 2 — 230b, 3 — 250b, 4 — 265b, 5 — 270b, 6 — 300b.

число ДН в которых ограничено величиной $N_{кр}$ ($\Delta w < 0$ при $N < N_{кр}$, $\Delta w > 0$ при $N > N_{кр}$), кривые 5, 6 соответствуют образованию рядов, для которых $N_{кр} \rightarrow \infty$ ($\Delta w < 0$). Поскольку наиболее вероятное число ДН в ряду определяется минимумом на зависимости $\Delta w(N)$, то кривым 2, 3, 4 и 5 соответствуют ряды, состоящие приблизительно из 1, 2, 5 и 20 дислокаций. Кривая 6 соответствует бесконечному ряду, т. е. однородному распределению ДН.

Таким образом, в качестве критерия, определяющего состояние дислокационной структуры границы раздела, можно принять существование такого конечного целого числа $N_{кр}$, что $\Delta w < 0$ при $N < N_{кр}$. Полученный критерий предсказывает существование четырех основных режимов заполнения границы дислокациями: 1) когерентная граница без ДН ($\Delta w > 0$ для любого N ; рис. 2, 1); 2) граница с отдельными случайно расположенными ДН ($\Delta w > 0$ для $N > N_{кр}$, $\Delta w < 0$ для $N < N_{кр}$; $\partial(\Delta w)/\partial N = 0$, $\partial^2(\Delta w)/\partial N^2 > 0$ для $N = 1$; рис. 2, 2); 3) граница со скоплениями ДН ($\Delta w > 0$ для $N > N_{кр}$, $\Delta w < 0$ для $N < N_{кр}$; $\partial(\Delta w)/\partial N = 0$, $\partial^2(\Delta w)/\partial N^2 > 0$ для $N > 1$; рис. 2, 3-5); 4) граница, однородно заполненная ДН ($\Delta w > 0$ для любого N ; рис. 2, 6).

Критическое число $N_{кр}$ ДН в ряду существенно зависит как от толщины пленки, так и от несоответствия f . Чем меньше f , тем больше интервал толщин Δh , при которых существуют отдельные скопления ДН (рис. 3).

Параметры h и f , при которых осуществляются переходы между отмеченными состояниями, являются критическими параметрами системы. Они могут быть численно рассчитаны с помощью выражения (5). Так, для каждого из фиксированных несоответствий можно определить критические толщины пленки h_{1-2} , h_{2-3} , h_{3-4} , отвечающие переходам между соответствующими состояниями, и интервал толщин Δh , в котором дефектная структура неоднородна. Например, для $f=10^{-2}$ $h_{1-2} \approx 13b$, $h_{2-3} \approx 14b$, $h_{3-4} \approx 15b$, $\Delta h \approx 2b$; для $f=10^{-3}$ $h_{1-2} \approx 215b$, $h_{2-3} \approx 227b$, $h_{3-4} \approx 270b$, $\Delta h \approx 55b$; для $f=10^{-4}$ $h_{1-2} \approx 3000b$, $h_{2-3} \approx 3200b$, $h_{3-4} \approx 4000b$, $\Delta h \approx 1000b$. Заметим, что сделанная здесь оценка для $f=10^{-2}$ критической толщины образования первых отдельных дислокаций $h_{1-2} \approx 13b$ совпадает с аналогичным результатом $h_{кр} \approx 13b$, полученным из решения задачи о равновесном состоянии в случае однородного распределения ДН [13].

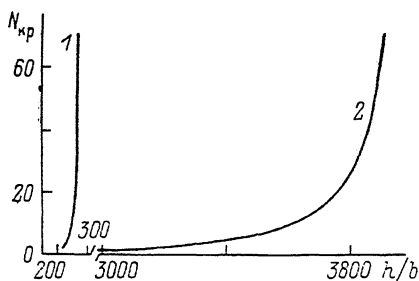


Рис. 3. Зависимость критического числа ДН в ряду от толщины пленки h при $f=10^{-3}$ (1) и 10^{-4} (2).

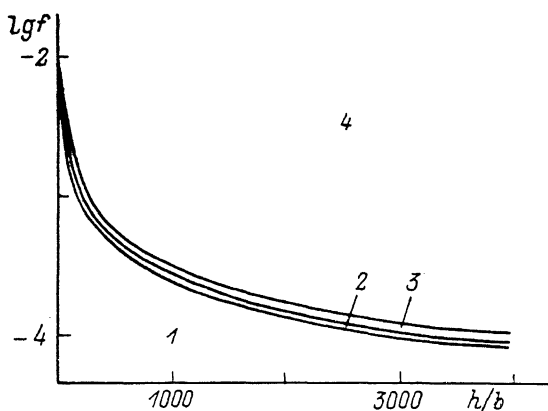


Рис. 4. Диаграмма $\lg f-h$ состояния дефектной структуры гетерограницы.

Отмечены области, соответствующие следующим состояниям: 1 — когерентное состояние границы без ДН; 2 — граница с отдельными, случайно расположенными ДН; 3 — граница со скоплениями ДН; 4 — граница, равномерно заполненная ДН.

Наглядное представление о полученных результатах дает диаграмма $\lg f-h$ (рис. 4), на которой представлены области существования отмеченных состояний.

Подводя итоги данной работы, отметим, что найденный энергетический критерий обладает очевидными достоинствами и недостатками, присущими рассмотрению любого вопроса с энергетической точки зрения. К достоинствам следует отнести то, что он совершенно не зависит (с известными, сделанными выше оговорками) от механизма зарождения ДН и в этом смысле универсален. Недостатком является то, что он позволяет определить лишь необходимые условия для реализации того или иного состояния. Достаточные условия будут определяться величинами, непосредственно влияющими на кинетику образования ДН, и могут быть сформулированы исходя из конкретного механизма их появления, как это делалось, например, в работе [9].

Полученные результаты могут использоваться для прогнозирования и управления состояниями дефектной структуры границ раздела в тонкопленочных гетеросистемах.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Matthews J. W. // Dislocations in Solids. Amsterdam: North-Holland Publ. Co. 1979. V. 2. P. 461-545.
- [2] Тхорик Ю. А., Хазан Л. С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев: Наукова думка, 1983. 304 с.
- [3] Мильвидский М. Г., Освенский В. В. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников. М.: Металлургия, 1985. 160 с.

- [4] Petroff P. M., Logan R. A., Savage A. // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 44. N 4. P. 287—291.
- [5] Вдовин В. И., Говорков А. В. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1983. Т. 47. № 6. С. 1205—1208.
- [6] Аргунова Т. С., Рувимов С. С., Сорокин Л. М., Шульпина И. Л. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 2960—2964.
- [7] Аргунова Т. С., Гуткин М. Ю., Романов А. Е., Рувимов С. С. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 2. С. 581—583.
- [8] Соловьев В. А., Плахотник В. Т. // Кристаллография. 1980. Т. 25. № 2. С. 312—318.
- [9] Владимиров В. И., Гуткин М. Ю., Романов А. Е. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 9. С. 2750—2753.
- [10] Покровский В. Л., Талапов А. Л. // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. № 1. С. 269—295.
- [11] Сонин Э. Б., Фомин Н. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 4. С. 1219—1221.
- [12] Muga T. // Advances in Materials Research. N. Y.: Interscience Publ., 1968. V. 3. P. 1—108.
- [13] Владимиров В. И., Гуткин М. Ю., Романов А. Е. // Поверхность. 1988. № 6. С. 46—51.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
18 июля 1989 г.