Процессы релаксации упругой энергии в гетероструктурах с напряженными нановключениями

© А.Л. Колесникова, А.Е. Романов*, В.В. Чалдышев*

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия
* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
E-mail: aer@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 28 июня 2006 г.)

Исследуется релаксация упругой энергии в системах, содержащих нановключения. Релаксация связана с образованием дислокационных петель: одиночной дислокационной петли несоответствия или группы таких петель на границе нановключения и окружающей матрицы и (или) дислокационной петли-сателлита вблизи включения. Определяются критические размеры включений, начиная с которых возможно зарождение дислокационных петель несоответствия и петель-сателлитов, для различных моделей релаксационных процессов. Приводятся расчетные и экспериментальные зависимости диаметра дислокационной петли-сателлита от размера включения.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-08-65503-а).

PACS: 68.65.Hb, 81.07.Ta

Хорошо известно, что в гетеросистемах „пленка–подложка“ упругая деформация возникает из-за несоответствия параметров кристаллических решеток тонкой пленки и массивной подложки. Упругая энергия такой гетероструктуры линейно зависит от толщины пленки. При достижении критического значения толщины происходит сброс упругой энергии за счет образования дислокаций несоответствия (MD) на интерфейсе [1–4]. Эти дислокации, расположенные в плоскости границы раздела пленки и подложки, и в особенности дислокации, проникающие с поверхности в пленку, приводят к нарушению электронных и оптоэлектронных свойств гетероструктуры в целом [5,6].

Аналогично пленочным гетерослоям упругая деформация структур, содержащих квантовые точки, обусловлена несоответствием параметров кристаллических решеток квантовой точки и окружающей матрицы (для случая объемных квантовых точек) или несоответствием параметров решеток квантовой точки и подложки (для случая поверхностных квантовых точек). Различие параметров решеток позволяет моделировать квантовые точки нановключениями и островками с заданной собственной деформацией (eigenstrain) $\boldsymbol{\varepsilon}^*$. Примеры такого моделирования объемных и поверхностных квантовых точек с различными видами собственной пластической деформации даны в работах [7–9] и [10,11] соответственно. Упругие искажения, вносимые нановключениями (квантовыми точками) в систему, рассчитываются по заданной собственной деформации [12]. Энергия упругих искажений включений пропорциональна их объему и гипотетически может достигать неограниченно больших значений. Существуют каналы релаксации упругой энергии системы с включениями, связанные с образованием дополнительных дефектов — дислокаций. Как и в случае пленочных гетероструктур, дислокации в структурах с включениями нежелательны, поскольку искажают электронные и оптоэлектронные свойства материалов (см., например [13]). Поэтому исследования процессов релаксации упругой энергии в гетероструктурах с квантовыми точками, моделируемыми нановключениями, носят и фундаментальный, и прикладной характер.

Для систем с нановключениями рассчитаны релаксационные пути, сопровождающиеся испусканием соосных дислокационных петель [14] и петель-сателлитов [15] или образованием дислокационных петель несоответствия [16].

В настоящей работе подробно анализируется случай одновременного зарождения одиночной дислокационной петли несоответствия на границе нановключения и окружающей его матрицы и сопутствующей дислокационной петли-сателлита. Для сравнения представлены ранее рассмотренные авторами случаи образования дислокационной петли-сателлита при изменении собственной деформации включения $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ [15] и зарождения на границе включения дислокационной петли несоответствия без выброса петли-сателлита [16,17].

Образование дислокационных дефектов во всех представленных в данной работе вариантах релаксации связано с диффузией атомов включения или матрицы. Отметим, что изменение формы и ориентации включения для случая разновеликости компонент собственной деформации [7,9,18,19] тоже можно считать диффузионными путями минимизации упругой энергии системы.

1. Общие схемы релаксации упругой энергии гетеросистем с нановключениями, сопровождающейся образованием дислокационных петель

Результатом исследуемых процессов релаксации упругой энергии нановключением является появление одной или более дислокационных петель. На рис. 1 схематично представлены возможные варианты образования дислокационных петель в системе с нановключениями.

Нановключение (NI) в форме сфероида окружено матрицей и до релаксации не имеет дислокаций ни на своей поверхности, ни вблизи себя (рис. 1, *a*). С ростом NI его упругая энергия достигает некоторого критического значения, при котором становится выгодным образование дислокационных петель. Для определенности считаем, что параметры решетки материала сфероида a_{NI} больше параметров решетки матрицы a_{mat}: $a_{\mathrm{NI}} > a_{\mathrm{mat}}$. Сброс упругой энергии может осуществляться за счет диффузии атомов матрицы, прилегающих к включению (рис. 1, *b, d, f*) [20]. Диффундирующие атомы образуют сопутствующую дислокационную петлю внедрения (рис. 1, *b, d*) или уходят (например, на свободную поверхность рис. 1, *f*). При этом на сфероиде может появиться дислокационная петля вычитания (рис. 1, *b, f*), либо уменьшается параметр несоответствия, а следовательно, и собственная деформация включения $\varepsilon_m^{\mathrm{final}} < \varepsilon_m^{\mathrm{initial}}$ (рис. 1, *d*). Дислокационная петля на границе NI является дислокационной петлей несоответствия и аналогична дислокации несоответствия, образующейся в тонкой напряженной пленке, находящейся на массивной подложке. Чтобы не ограничивать общность рассмотрения, на фрагментах *c, e, g* рис. 1 показаны аналогичные дислокационные петли, но образованные продиффундировавшими атомами из сфероида в окружающий кристалл. Петель несоответствия может быть несколько и опоясывать включение они могут в разных направлениях (рис. 1, *h*).

Петли-сателлиты обнаружены экспериментально вблизи нанокластеров, образовавшихся в δ-допированном сурьмой арсениде галлия [15], и ранее в твердом растворе фосфора в германии [21].

Дислокации несоответствия неоднократно наблюдались в системах с островками (см., например, работы [22,23]). Дислокацию несоответствия на включении, внедренном в матрицу, трудно идентифицировать. Это связано с отсутствием эталонных расчетных электронно-микроскопических изображений дислокаций на включении, а при атомном разрешении проблематично обнаружить недостающий (или добавочный) атомный слой, связанный с дислокацией.

Далее приводятся расчеты трех возможных случаев расположения дислокационной петли в системе с нановключением: вне и на его поверхности, одновременно и по отдельности.

2. Упругие поля и энергии включений

В наших модельных расчетах включение внедрено в кристалл (рис. 1, *a*). Несоответствие параметра кристаллической решетки этого дефекта a_{NI} и параметра решетки окружающей матрицы a_{mat} имеет смысл собственной деформации [16,17] и определяется как

$$\varepsilon_m = \frac{a_{\mathrm{NI}} - a_{\mathrm{mat}}}{a_{\mathrm{NI}}}. \tag{1}$$

Заметим, что знак ε_m в выражении (1) противоположен знаку параметра несоответствия, который обычно используется при описании гетероэпитаксиальной тонкой пленки на толстой подложке (см., например, [2]).

Для включения NI, окруженного со всех сторон матрицей, собственная деформация ε_{ij}^* в общем виде может быть записана в следующей форме:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^* = \begin{pmatrix} \varepsilon_{m\,xx} & \varepsilon_{m\,xy} & \varepsilon_{m\,xz} \\ \varepsilon_{m\,xy} & \varepsilon_{m\,yy} & \varepsilon_{m\,yz} \\ \varepsilon_{m\,zx} & \varepsilon_{m\,zy} & \varepsilon_{m\,zz} \end{pmatrix} \delta(\Omega_{\mathrm{NI}}), \tag{2}$$

где диагональные члены соответствуют дилатационному несоответствию кристаллических решеток включения NI и окружающей матрицы, а остальные члены имеют значение сдвигового несоответствия кристаллических решеток;

$$\delta(\Omega_{\mathrm{NI}}) = \begin{cases} 1, & r \in \Omega_{\mathrm{NI}} \\ 0, & r \notin \Omega_{\mathrm{NI}} \end{cases}, \quad \Omega_{\mathrm{NI}} \text{ — область, занимаемая NI.}$$

Упругие поля включения (напряжения σ_{ij} и деформация ε_{ij}) и поле полных смещений u_j вычисляются по данной собственной деформации (2) и, следовательно, зависят от несоответствия $\varepsilon_{m\,kl}$ и области локализации включения Ω_{NI}. Расчет упругих полей включения проводится по известной схеме с использованием упругих модулей, функции Грина упругой среды или ее Фурье-образа [12]. Для объемных дефектов сфероидальной или эллипсоидальной формы упругие поля представляются аналитически. Например, ненулевые компоненты напряжений сфероида с несоответствием по трем координатным осям $\varepsilon_{xx}^* = \varepsilon_{m\,xx}$, $\varepsilon_{yy}^* = \varepsilon_{m\,yy}$, $\varepsilon_{zz}^* = \varepsilon_{m\,zz}$ ($\varepsilon_{ij}^* = 0$, $i \neq j$) в изотропном случае имеют вид [8,12]

$$\sigma_{xx}^{(in)} = -\frac{2G}{15(1-\nu)}\Big[8\varepsilon_{m\,xx} + \varepsilon_{m\,yy}(5\nu+1) + \varepsilon_{m\,zz}(5\nu+1)\Big],$$

$$\sigma_{ij}^{(in)} = 0, \qquad (i \neq j),$$

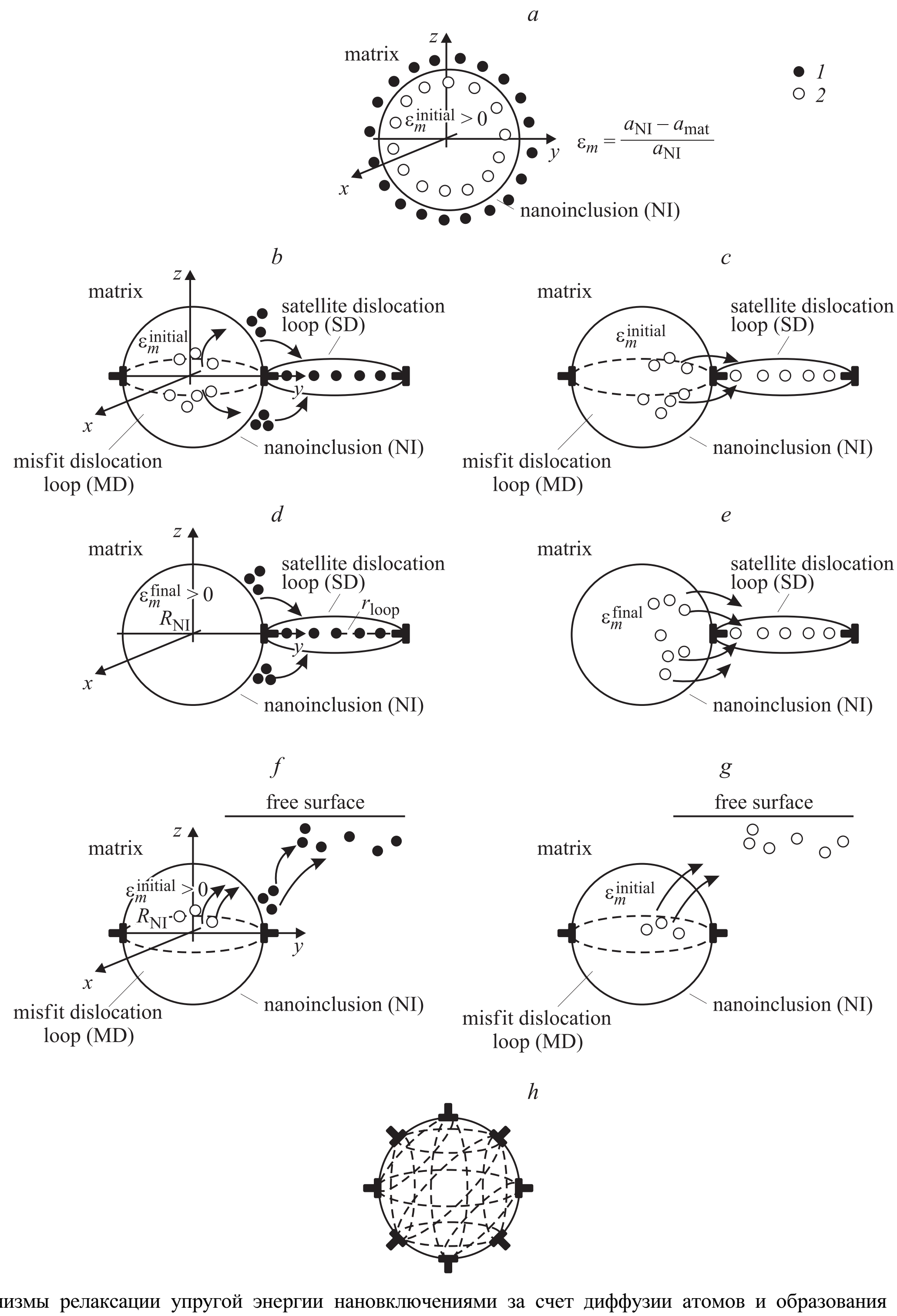

Рис. 1. Механизмы релаксации упругой энергии нановключениями за счет диффузии атомов и образования дислокационных петель. *a* — нановключение (NI) в матрице до процесса релаксации. *1* — атомы матрицы, *2* — атомы включения; *b* — диффузия атомов из прилегающей к нановключению (NI) матрицы и образование петлевой дислокации несоответствия (MD) и сопутствующей дислокационной петли-сателлита (SD), ε_m — параметр несоответствия; *c* — диффузия атомов из нановключения и образование петлевой дислокации несоответствия и сопутствующей дислокационной петли-сателлита; *d* — диффузия атомов из прилегающей к нановключению (NI) матрицы и образование дислокационной петли-сателлита (SD), $\varepsilon_m^{\text{initial}}$, $\varepsilon_m^{\text{final}}$ — параметр несоответствия до и после образования сопутствующей дислокационной петли; *e* — диффузия атомов из нановключения и образование дислокационной петли-сателлита; *f* — диффузия атомов из прилегающей к нановключению (NI) матрицы на свободную поверхность и образование петлевой дислокации несоответствия (MD), ε_m — параметр несоответствия; *g* — диффузия атомов из нановключения на свободную поверхнось и образование петлевой дислокации несоответствия; *h* — образование семейств петлевых дислокаций несоответствия на включении. Стрелками на частях *b*–*g* указаны направления диффузионных потоков.

$$\sigma_{xx}^{(out)} = \frac{G}{15(1-\nu)\tilde{R}^9}\Big[\varepsilon_{m\,xx}\big(24\tilde{x}^4 - 40\tilde{x}^6 - 72\tilde{x}^2\tilde{y}^2 + 9\tilde{y}^4 + 45\tilde{x}^2\tilde{y}^4 + 5\tilde{y}^6 - 72\tilde{x}^2\tilde{z}^2 + 18\tilde{y}^2\tilde{z}^2 + 90\tilde{x}^2\tilde{y}^2\tilde{z}^2 + 15\tilde{y}^4\tilde{z}^2 + 9\tilde{z}^4 + 45\tilde{x}^2\tilde{z}^4 + 15\tilde{y}^2\tilde{z}^4 + 5\tilde{z}^6\big) + \varepsilon_{m\,yy}\big(-12\tilde{x}^4 + 10\tilde{x}^6 + 81\tilde{x}^2\tilde{y}^2 - 45\tilde{x}^4\tilde{y}^2 - 12\tilde{y}^4 - 45\tilde{x}^2\tilde{y}^4 + 10\tilde{y}^6 - 9\tilde{x}^2\tilde{z}^2 + 15\tilde{x}^4\tilde{z}^2 - 9\tilde{y}^2\tilde{z}^2 - 45\tilde{x}^2\tilde{y}^2\tilde{z}^2 + 15\tilde{y}^4\tilde{z}^2 + 3\tilde{z}^4 - 5\tilde{z}^6 - 10\nu\tilde{x}^6 - 30\nu\tilde{x}^4\tilde{y}^2 - 30\nu\tilde{x}^2\tilde{y}^4 - 10\nu\tilde{y}^6 + 30\nu\tilde{x}^2\tilde{z}^4 + 30\nu\tilde{y}^2\tilde{z}^4 + 20\nu\tilde{z}^6\big) + \varepsilon_{m\,zz}\big(-12\tilde{x}^4 + 10\tilde{x}^6 + 81\tilde{x}^2\tilde{z}^2 - 45\tilde{x}^4\tilde{z}^2 - 12\tilde{z}^4 - 45\tilde{x}^4\tilde{z}^2 + 10\tilde{z}^6 - 9\tilde{x}^2\tilde{y}^2 + 15\tilde{x}^4\tilde{y}^2 - 9\tilde{y}^2\tilde{z}^2 - 45\tilde{x}^2\tilde{y}^2\tilde{z}^2 + 15\tilde{z}^4\tilde{y}^2 + 3\tilde{y}^4 - 5\tilde{y}^6 - 10\nu\tilde{x}^6 - 30\nu\tilde{x}^4\tilde{z}^2 - 30\nu\tilde{x}^2\tilde{z}^4 - 10\nu\tilde{z}^6 + 30\nu\tilde{x}^2\tilde{y}^4 + 30\nu\tilde{z}^2\tilde{y}^4 + 20\nu\tilde{y}^6\big)\Big],$$

$$\sigma_{xy}^{(out)} = \frac{G\tilde{x}\tilde{y}}{(1-\nu)\tilde{R}^9}\Big[\varepsilon_{m\,xx}\big(4\tilde{z}^2 - 4\tilde{x}^4 - 3\tilde{y}^2 - 3\tilde{x}\tilde{y}^2 + \tilde{y}^4 - 3\tilde{z}^2 - 3\tilde{x}^2\tilde{z}^2 + 2\tilde{y}^2\tilde{z}^2 + \tilde{z}^4\big) + \varepsilon_{m\,yy}\big(4\tilde{y}^2 - 4\tilde{y}^4 - 3\tilde{x}^2 - 3\tilde{x}^2\tilde{y}^2 + \tilde{x}^4 - 3\tilde{z}^2 - 3\tilde{y}^2\tilde{z}^2 + 2\tilde{x}^2\tilde{z}^2 + \tilde{z}^4\big) + \varepsilon_{m\,zz}\big(-\tilde{x}^2 + \tilde{x}^4 - \tilde{y}^2 + 2\tilde{x}^2\tilde{y}^2 + \tilde{y}^4 - 6\tilde{z}^2 - 3\tilde{x}^2\tilde{z}^2 - 3\tilde{y}^2\tilde{z}^2 - 4\tilde{z}^4 - 2\nu\tilde{x}^4 - 4\nu\tilde{x}^2\tilde{y}^2 - 2\nu\tilde{y}^4 - 4\nu\tilde{x}^2\tilde{z}^2 - 4\nu\tilde{y}^2\tilde{z}^2 - 2\nu\tilde{z}^4\big)\Big]. \quad (3)$$

Здесь напряжения даны в декартовой системе координат (x, y, z), связанной с центром сфероида (рис. 1, a). Компоненты напряжений $\sigma_{yy}^{(in),(out)}$ и $\sigma_{zz}^{(in),(out)}$ определяются циклической перестановкой индексов и координат (x, y, z) в выражениях для $\sigma_{xx}^{(in),(out)}$; компоненты $\sigma_{zx}^{(out)}$, $\sigma_{yz}^{(out)}$ находятся перестановкой индексов и координат (x, y, z) в выражении для $\sigma_{xy}^{(out)}$. Верхний индекс (in), (out) обозначает внутреннюю или внешнюю область сфероида соответственно; ν — коэффициент Пуассона, G — модуль сдвига, $\tilde{R} = R/R_{\mathrm{NI}}$, $\tilde{x} = x/R_{\mathrm{NI}}$, $\tilde{y} = y/R_{\mathrm{NI}}$, $\tilde{z} = z/R_{\mathrm{NI}}$, $R^2 = r^2 + z^2$, $r^2 = x^2 + y^2$, R_{NI} — радиус сфероидального включения.

Упругая энергия включения с известной собственной деформацией (2) может быть записана следующим образом [12]:

$$E_{\mathrm{NI}} = -\frac{1}{2}\int \varepsilon_{ij}^{*}\sigma_{ij}^{(in)}dV, \quad (4)$$

где $\sigma_{ij}^{(in)}$ — компоненты тензора напряжений внутри включения.

В случае когда параметры несоответствия равны по трем осям $\varepsilon_{xx}^{*} = \varepsilon_{yy}^{*} = \varepsilon_{zz}^{*} = \varepsilon_m$ и сдвиговые компоненты собственной деформации отсутствуют, упругая энергия сфероидального дефекта представляется формулой $E_{\mathrm{NI}} = \frac{8\pi(1+\nu)}{3(1-\nu)}G\varepsilon_m^2 R_{\mathrm{NI}}^3$. Для напряженного сфероида с одноосной однородной собственной деформацией ($\varepsilon_{zz}^{*} = \varepsilon_m$, $\varepsilon_{xx}^{*} = \varepsilon_{yy}^{*} = 0$) — $E_{\mathrm{NI}} = \frac{32\pi}{45(1-\nu)}G\varepsilon_m^2 R_{\mathrm{NI}}^3$ [12]. Видно, что с ростом радиуса включения его упругая энергия растет по кубическому закону.

Начиная с некоторого критического значения радиуса R_C, „запускается“ механизм сброса упругой энергии квантовой точки. Энергетическим критерием такого „запуска“ является

$$E^{\mathrm{initial}} \geq E^{\mathrm{final}}, \quad (5)$$

здесь E^{initial}, E^{final} — упругая энергия системы с нановключением до и после релаксации.

3. Парное образование призматической дислокационной петли несоответствия на включении и петли-сателлита вблизи него (рис. 1, b, c)

Рассмотрим квантовую точку сферической формы с равноосной собственной деформацией: $\varepsilon_{ii}^{*} = \varepsilon_m$, $\varepsilon_{ij}^{*} = 0$ $(i \neq j,\ i, j = x, y, z)$. Поле напряжений (3) включения, моделирующего такую квантовую точку, значительно упрощается. Например, внутри включения

$$\sigma_{xx}^{(in)} = \sigma_{yy}^{(in)} = \sigma_{zz}^{(in)} = -\frac{4(1+\nu)G\varepsilon_m}{3(1-\nu)}. \quad (6)$$

При достижении энергией включения NI E_{NI} некоторой критической величины система „NI$-$матрица“ преобразуется в систему „NI$-$дислокационная петля несоответствия MD$-$петля-сателлит SD$-$матрица“. Энергетическое условие (5) такого пути релаксации примет вид

$$E_{\mathrm{NI}} \geq E_{\mathrm{NI}} + E_{\mathrm{MD}} + E_{\mathrm{SD}} + E_{\mathrm{NI-MD}} + E_{\mathrm{NI-SD}} + E_{\mathrm{MD-SD}}. \quad (7)$$

Здесь E_{MD}, E_{SD} — энергии дислокационной петли несоответствия и петли-сателлита; $E_{\mathrm{NI-MD}}$, $E_{\mathrm{NI-SD}}$ — энергии взаимодействия включения с дислокационными петлями; $E_{\mathrm{MD-SD}}$ — энергия взаимодействия петель.

Дополнительное условие, учитывающее постоянство вещества в рассматриваемой системе (так называемый закон сохранения масс) и связывающее радиусы образовавшихся петель, представляют собой следующее равенство:

$$b_{\mathrm{MD}}S_{\mathrm{MD}} = b_{\mathrm{SD}}S_{\mathrm{SD}}, \quad (8)$$

где b_{MD}, b_{SD} — величины векторов Бюргерса петель; S_{MD}, S_{SD} — площади, занимаемые MD- и SD-петлей соответственно; $S_{\mathrm{MD}} = \pi r_{\mathrm{MD}}^2$, $S_{\mathrm{SD}} = \pi r_{\mathrm{SD}}^2$. В частности, из условия (8) видно, что радиус петли-сателлита прямо пропорционален радиусу петли несоответствия; $r_{\mathrm{SD}} = \beta r_{\mathrm{MD}}$, $\beta = \sqrt{\frac{b_{\mathrm{MD}}}{b_{\mathrm{SD}}}}$.

Для представления неравенства (7) в развернутом виде воспользуемся выражением для энергии взаимодействия двух дефектов (в нашем случае включения и петли) [12]

$$E_{\mathrm{I-II}} = -\int\limits_{\Omega_{\mathrm{I}}} \varepsilon_{ij}^{*\mathrm{I}} \sigma_{ij}^{\mathrm{II}} dV = -\int\limits_{\Omega_{\mathrm{II}}} \varepsilon_{ij}^{*\mathrm{II}} \sigma_{ij}^{\mathrm{I}} dV, \qquad (9)$$

где Ω_{I}, Ω_{II} — области, занимаемые дефектами I и II соответственно; $\varepsilon_{ij}^{*\mathrm{I}}$, $\varepsilon_{ij}^{*\mathrm{II}}$ — собственные деформации дефектов; σ_{ij}^{I}, $\sigma_{ij}^{\mathrm{II}}$ — упругие напряжения, создаваемые дефектами.

После подстановок соотношение (7) примет вид

$$\frac{Gb_{\mathrm{MD}}^2 r_{\mathrm{MD}}}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{1.08\alpha r_{\mathrm{MD}}}{b_{\mathrm{MD}}}\right) + \frac{Gb_{\mathrm{SD}}^2 r_{\mathrm{SD}}}{2(1-\nu)} \left(\ln \frac{1.08\alpha r_{\mathrm{SD}}}{b_{\mathrm{SD}}}\right) - \frac{4\pi(1+\nu)Gb_{\mathrm{MD}}\varepsilon_m R_{\mathrm{NI}}^2}{3(1-\nu)}$$
$$- \int\limits_{S_{\mathrm{SD}}} b_{\mathrm{SD}} \sigma_{zz}^{(out)}\Big|_{S=S_{\mathrm{SD}}} dS - \int\limits_{S_{\mathrm{SD}}} b_{\mathrm{SD}} \sigma_{zz}^{\mathrm{MD}}\Big|_{S=S_{\mathrm{SD}}} dS \le 0, \qquad (10)$$

где первые два слагаемых — энергии дислокационной петли несоответствия и петли-сателлита соответственно в приближении $r_{\mathrm{MD,SD}} \gg b_{\mathrm{MD,SD}}$ [24]; третий член — энергия взаимодействия включения NI и дислокационной петли несоответствия; интегральные слагаемые — энергии взаимодействия петли-сателлита с NI и дислокационной петлей несоответствия. Интегралы записаны с условием геометрии рис. 1, интегрирование ведется по площади петли-сателлита, $\sigma_{ij}^{\mathrm{MD}}$ — тензор напряжений дислокационной петли несоответствия. Параметр α учитывает энергетический вклад ядра дислокации и может принимать значения 1–4 [25].

Поле напряжений призматической круговой петли „loop“ (в частности, MD- или SD-петли) с собственной деформацией $\varepsilon_{zz}^* = \pm bH\left(1 - \frac{r}{r_{\mathrm{loop}}}\right)\delta(z)$ имеет вид [24]

$$\sigma_{rr}^{\mathrm{loop}} = \pm \frac{Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{1-2\nu}{r} J(1,1;0) + \frac{|z|}{r_{\mathrm{loop}}^2} J(1,0;2) - \frac{1}{r_{\mathrm{loop}}} J(1,0;1) - \frac{|z|}{r_{\mathrm{loop}}} J(1,1;1)\right],$$

$$\sigma_{\varphi\varphi}^{\mathrm{loop}} = \pm \frac{Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{2\nu-1}{r} J(1,1;0) - \frac{2\nu}{r_{\mathrm{loop}}} J(1,0;1) + \frac{|z|}{r_{\mathrm{loop}} r} J(1,1;1)\right],$$

$$\sigma_{zz}^{\mathrm{loop}} = \mp \frac{Gb}{2(1-\nu)} \left[\frac{1}{r_{\mathrm{loop}}} J(1,0;1) + \frac{|z|}{r_{\mathrm{loop}}^2} J(1,0;2)\right],$$

$$\sigma_{rz} = \mp \frac{Gb}{2(1-\nu)} \frac{z}{r_{\mathrm{loop}}^2} J(1,1;2),$$

$$\sigma_{z\varphi} = \sigma_{r\varphi} = 0. \qquad (11)$$

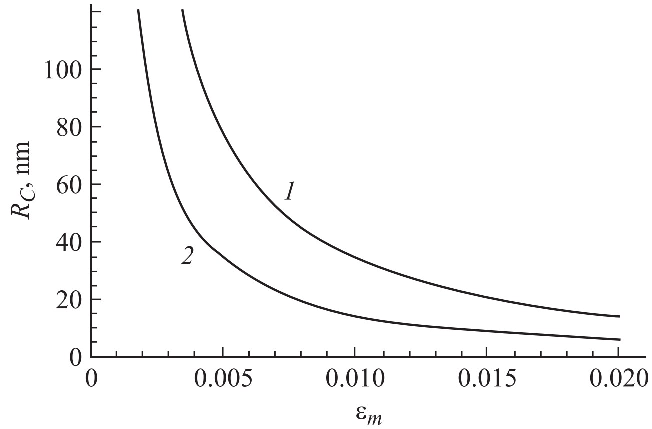

Рис. 2. Зависимости критического радиуса сферического включения R_C от величины параметра несоответствия ε_m при различных путях релаксации напряжений. *1* — релаксация сопровождается образованием петлевой дислокации несоответствия на включении и дислокационной петли-сателлита вблизи него; *2* — релаксация сопровождается образованием одиночной петлевой дислокации несоответствия на включении. Графики построены при следующих параметрах: коэффициент Пуассона $\nu = 0.3$, константа вклада ядра дислокации $\alpha = 4$, величина вектора Бюргерса дислокации $b = 0.3$ nm.

В формулах (11) использована система координат, связанная с центром петли и с осью OZ, перпендикулярной плоскости петли; b — величина вектора Бюргерса петли; $H\left(1 - \frac{r}{r_{\mathrm{loop}}}\right)$ — функция Хевисайда; $\delta(z)$ — дельта-функция; r_{loop} — радиус петли; ν — коэффициент Пуассона; G — модуль сдвига. $J(m,n;p)$ — интегралы Лифшица–Ханкеля [26], задаваемые соотношением $J(m,n;p) = \int\limits_0^\infty J_m(\kappa) J_n\left(\kappa \frac{r}{r_{\mathrm{loop}}}\right) \exp\left(-\kappa \frac{|z|}{r_{\mathrm{loop}}}\right) \kappa^p d\kappa$; $J_m(\kappa)$ — функция Бесселя.

Отметим, что условие (10) применимо и для расчета релаксации с испусканием соосной включению петли-сателлита [14]. При этом в четвертом слагаемом (10) плоскость петли-сателлита может захватывать внутреннюю область включения, и тогда часть интегирования ведется с напряжениями $\sigma_{ij}^{(in)}$.

Для оценки полагаем, что дислокационная петля несоответствия имеет экваториальное расположение на сфероидальном включении $r_{\mathrm{MD}} = R_{\mathrm{NI}}$, величины векторов Бюргерса дислокационных петель приблизительно равны $b_{\mathrm{MD}} = b_{\mathrm{SD}} = b$, а интегральные слагаемые малы по сравнению с аналитическими членами. В этом случае критический радиус квантовой точки R_C, при котором возможна релаксация упругой энергии с парным образованием петли несоответствия и петли-сателлита, определяется из соотношения

$$R_C \approx \frac{3b}{4\pi(1+\nu)\varepsilon_m} \left(\ln \frac{1.08\alpha R_C}{b}\right). \qquad (12)$$

Подчеркнем, что выражение (12) приближенное и может быть использовано только для определения порядка величины критического радиуса. На рис. 2 приведен график зависимости критического радиуса от значения несоответствия (кривая *1*), полученный на основе точного расчета критерия (10) с учетом интегральных членов.

4. Одиночная призматическая дислокационная петля вблизи включения (рис. 1, *d, e*)

Рассмотрим включение сферической формы, обладающей одноосной собственной дилатацией. Собственная деформация для него определяется соотношением: $\varepsilon^*_{zz} = \varepsilon_m$, $\varepsilon^*_{xx} = \varepsilon^*_{yy} = 0$. Подобные объекты наблюдались в экспериментах с арсенидом галлия (подробно см. [15]).

Условие „запуска" процесса релаксации (5) содержит начальную упругую энергию системы E^{initial}, которая в данной модели является упругой энергией включения $E^{\text{initial}}_{\text{NI}}$, и конечную энергию системы E^{final}. Последняя складывается из конечной упругой энергии включения $E^{\text{final}}_{\text{NI}}$, упругой энергии призматической дислокационной петли-сателлита E_{SD} и энергии взаимодействия включения и петли $E_{\text{NI-SD}}$. С учетом изложенного условие (5) представляется в виде

$$E^{\text{initial}}_{\text{NI}} \ge E^{\text{final}}_{\text{NI}} + E_{\text{SD}} + E_{\text{NI-SD}}. \quad (13)$$

Диффузия атомов из пространства, прилегающего к включению (рис. 1, *d*), или из самого включения (рис. 1, *e*) приводит к изменению параметра несоответствия ε_m и, следовательно, собственной деформации. Эту ситуацию можно представить себе и как появление распределенных по поверхности нановключения семейства дислокационных петель (рис. 1, *h*).

Согласно закону сохранения масс имеем

$$\left(\varepsilon^{\text{initial}}_m - \varepsilon^{\text{final}}_m\right) V_{\text{NI}} = bS_{\text{SD}}, \quad (14)$$

где $V_{\text{NI}} = \frac{4\pi}{3} R^3_{\text{NI}}$, $S_{\text{SD}} = \pi r^2_{\text{SD}}$.

Отсюда находим разность параметров несоответствия до и после процесса образования петли-сателлита

$$\Delta\varepsilon_m = \frac{3br^2_{\text{SD}}}{4R^2_{\text{NI}}}. \quad (15)$$

Минимум упругой энергии системы в конечном состоянии позволяет определить зависимость радиуса образовавшейся петли от радиуса включения при заданном значении параметра несоответствия $\varepsilon^{\text{initial}}_m$

$$\frac{\partial}{\partial r_{\text{SD}}}\left(\frac{32\pi G}{45(1-\nu)}\left(\varepsilon^{\text{initial}}_m - \frac{3br^2_{\text{SD}}}{4R^3_{\text{NI}}}\right)^2 R^3_{\text{NI}} + \frac{Gb^2 r_{\text{SD}}}{2(1-\nu)}\left(\ln\frac{1.08\alpha r_{\text{SD}}}{b}\right) - \int\limits_{S_{\text{SD}}} b\sigma^{(out)}_{zz}\Big|_{S_{\text{SD}}} dS\right) = 0. \quad (16)$$

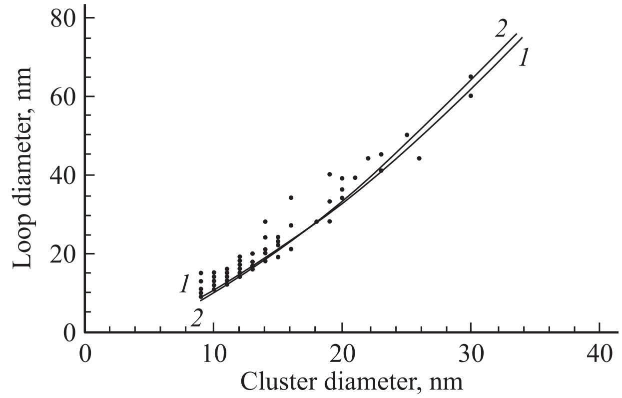

Рис. 3. Экспериментальная и теоретическая зависимости диаметра сопутствующей дислокационной петли от диаметра кластера в арсениде галлия, δ-допированном сурьмой при низкой температуре. Величины параметра несоответствия и вектора Бюргерса соответственно равны: *1* — $\varepsilon_m = 0.065$, $b = 0.28$ nm, *2* — $\varepsilon_m = 0.035$, $b = 0.14$ nm. Коэффициент Пуассона $\nu = 0.3$. Точками представлены экспериментальные данные, полученные для GaAs, выращенного при 200°C и отожженного при 500–600°C [15].

На рис. 3 показаны экспериментальная и теоретическая зависимости диаметра сопутствующей дислокационной петли от диаметра кластера в арсениде галлия, δ-допированном сурьмой при низкой температуре [15]. Величина вектора Бюргерса b дислокационной петли в данных экспериментах была определена с точностью до коэффициента 2. Если предположить, что атомы, образовавшие петлю, диффундировали из области матрицы GaAs, прилегающей к кластеру (рис. 1, *d*), то $b = 0.28$ nm. Предположение о диффузии атомов сурьмы из кластера (рис. 1, *e*) приводит к величине вектора Бюргерса $b = 0.14$ nm. На рис. 3 приведены оба возможных расчетных варианта. Значения параметра несоответствия представляли собой разумные гипотетические величины.

5. Одиночная призматическая дислокационная петля на поверхности квантовой точки (рис. 1, *f, g*)

Пусть для системы „нановключение NI–матрица" выполнено условие $\varepsilon^*_{ii} = \varepsilon_m$, $\varepsilon^*_{ij} = 0$ $(i \ne j,\ i, j = x, y, z)$. Как и в первом из рассмотренных механизмов релаксации, поле напряжений квантовой точки (3) значительно упрощается. Полагаем, что собственная упругая энергия квантовой точки до и после образования дислокационной петли несоответствия остается постоянной $E^{\text{initial}}_{\text{NI}} = E^{\text{final}}_{\text{NI}}$. Тогда критерий зарождения петли несоответствия можно представить условием

$$0 \ge E_{\text{MD}} + E_{\text{NI-MD}}, \quad (17)$$

где обозначения те же, что и в формуле (7).

С учетом экваториального расположения дислокационной петли несоответствия на сфероиде выражение (17) имеет вид

$$\frac{Gb^2R_{\mathrm{NI}}}{2(1-\nu)}\left(\ln\frac{1.08\alpha R_{\mathrm{NI}}}{b}\right)-\frac{4\pi Gb\varepsilon_m(1+\nu)R_{\mathrm{NI}}^2}{3(1-\nu)}\le 0, \quad (18)$$

где использованы те же обозначения, что и в предыдущих формулах.

Пороговое значение радиуса квантовой точки, при котором на квантовой точке образуется петля, описывается соотношением

$$R_C=\frac{3b}{8\pi(1+\nu)\varepsilon_m}\left(\ln\frac{1.08\alpha R_C}{b}\right). \quad (19)$$

На рис. 2 кривая *2* показывает зависимость $R_C(\varepsilon_m)$ для рассмотренного выше пути релаксации упругой энергии.

6. Обсуждение результатов

Предложенные в работе механизмы релаксации упругой энергии в системах с напряженными нановключениями основаны на энергетическом критерии возможности их реализации. Суть рассматриваемых процессов одна — пластическая деформация с переносом избыточного или недостающего вещества от включения или к нему. Идея об образовании дислокационной петли на границе включения и окружающей его матрицы основана, во-первых, на аналогии этой границы с границей между тонкой пленкой и толстой подложкой, где наблюдаются дислокации несоответствия [1–4] и, во-вторых, на подобии включений и островков, на которых также обнаружены дислокации несоответствия [22,23]. Для островка процесс релаксации подобен протекающему в пленках, т. е. образование дислокации несоответствия (или ансамбля дислокаций) на границе контакта с подложкой. При этом дислокацию можно рассматривать как фрагмент дислокационной петли, линия которой проходит частично по свободной поверхности островка, частично по границе его контакта с подложкой. На основании лишь приведенных расчетов нельзя определить предпочтительный путь релаксации напряжений в гетероструктуре с нановключениями. Рассчитанные критические величины размеров наночастиц (рис. 1, *b, c, f, g*), при которых энергетически выгоден процесс образования дислокаций, для рассмотренных случаев расположения петель имеют один порядок (рис. 2). Такого же порядка и наблюдаемый в эксперименте критический размер кластера (при аналогичном параметре несоответствия), вблизи которого зарождается петля-сателлит (рис. 3).

„Выбор“ пути релаксации гетеросистемой заключается, видимо, в способе ее образования. Разница между нановключениями (квантовыми точками) типа InAs в GaAs или Ge в Si и кластерами As–Sb в GaAs состоит в том, что первые формируются на поверхности или вблизи нее, а кластеры — в объеме. В квантовых точках избыток вещества, возникающий при пластической деформации, уходит на поверхность. Кинетически это может, например, происходить путем зарождения дислокации на открытой поверхности квантовой точки в процессе ее (точки) формирования с последующим скольжением или переползанием к интерфейсу с матрицей и формированием замкнутой дислокационной петли при заращивании. В случае кластеров As–Sb в GaAs расстояние до поверхности значительно больше длины диффузии при температурах формирования кластеров. В результате вытесняемый растущим кластером материал матрицы формирует дислокационную петлю внедрения вблизи кластера одновременно с формированием петли дислокации несоответствия на самом кластере. Сумма собственных энергий дислокационных колец и энергий их взаимодействия друг с другом и кластером оказывается меньше упругой энергии когерентно-встроенного кластера. Таким образом, в случае кластера As–Sb механизм релаксации упругой энергии реализуется в консервативной системе (материал матрицы, окружавший кластер преобразуется в дислокационную петлю внедрения), а в случае квантовых точек система является открытой за счет того, что поверхность служит бесконечно емким стоком материала. Дислокационные петли вблизи включения наблюдались в экспериментах [14,15,21]. Результаты предложенных расчетов зависимости диаметра дислокационной петли от диаметра включения совпадают с опытными данными. Нелинейный характер зависимости указывает на уменьшение собственной деформации включения в целом (рис. 1, *d, e*), а не на образование пары дислокационных петель MD–SD (рис. 1, *b, c*).

Отметим, что испускание дислокационной петли, соосной эллипсоидальному дефекту [14], рассматривается нами, как частный случай расположения петли-сателлита, а не как отдельный механизм релаксации напряжений.

Список литературы

[1] J.W. Mathews, A.E. Blakeslee. J. Cryst. Growth **27**, 118 (1974); **29**, 273 (1975); **32** 265 (1976).
[2] R. Beanland, D.J. Dunstan, P.J. Goodhew. Adv. Phys. **45**, 87 (1996).
[3] D.J. Dunstan. J. Mater. Sci.: Mater. Electr. **8**, 337 (1997).
[4] A.E. Romanov. Z. Metallkunde **96**, 455 (2005).
[5] S. Nakamura. Science **281**, 956 (1998).
[6] H.V. Yu., H. Chen, D. Li, J. Wang, Z.G. Xing, X.H. Zheng, Q. Huang, J.M. Zhou. J. Crystal Growth **266**, 455 (2004).
[7] M. Kato, T. Fujii, S. Onaka. Mat. Sci. Eng. A **211**, 95 (1996).
[8] Н.А. Берт, А.Л. Колесникова, А.Е. Романов, В.В. Чалдышев. ФТТ **44**, 2139 (2002).
[9] N. Usami, T. Ichitsubo, T. Ujihara, T. Takahashi, K. Fujiwara, G. Sazaki, K. Nakajima. J. Appl. Phys. **94**, 916 (2003).
[10] A.D. Andreev, E.P. O'Reilly. Phys. Rev. B **62**, 15 851 (2000).
[11] J. Stangl, V. Holsy, G. Bauer. Rev. Modern Phys. **76**, 725 (2004).

[12] T. Mura. Micromechanics of defects in solids. Martinus Nijhoff. Boston (1987). 587 p.
[13] X. Chen, Y. Lou, A.C. Samia, C. Burda. Nanolett. **3**, 799 (2003).
[14] D.D. Dunand, A. Mortensen. Scripta Met. Mat. **25**, 761 (1991).
[15] V.V. Chaldyshev, A.L. Kolesnikova, N.A. Bert, A.E. Romanov. J. Appl. Phys. **97**, 024309 (2005).
[16] A.L. Kolesnikova, A.E. Romanov. Phil. Mag. Lett. **84**, 501 (2004).
[17] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. Письма в ЖТФ **30**, 89 (2004).
[18] E. Pehlke, N. Moll, A. Kley, M. Scheffler. Appl. Phys. A **65**, 525 (1997).
[19] A.L. Kolesnikova, I.A. Ovid'ko. Phys. Rev. B **69**, 035412 (2004).
[20] Я.Е. Гегузин. Живой кристалл. Наука, М. (1981). 192 с.
[21] Н.Д. Захаров, В.Н. Рожанский, Р.Л. Корчажкина. ФТТ **16**, 1444 (1974).
[22] F.K. LeGoues, M.C. Reuter, J. Tersoff, M. Hammar, R.M. Tromp. Phys. Rev. Lett. **73**, 300 (1994).
[23] H.J. Chu, J. Wang. J. Appl. Phys. **98**, 034315 (2005).
[24] J. Dundurs, A.J. Salamon. J. Phys. C **50**, 125 (1972).
[25] J.P. Hirth, J. Lothe. Theory of Dislocations. Wiley, N.Y. (1982). 752 p.
[26] G. Eason, B. Noble, I.N. Sneddon. Phil. Trans. R. Soc. **247**, 529 (1955).