

## Равновесные конфигурации частичных дислокаций несоответствия в тонкопленочных гетеросистемах

© М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, И.А. Овидько

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,  
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: gutkin@pgpt.ioffe.rssi.ru  
gutkin@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 25 мая 1998 г.)

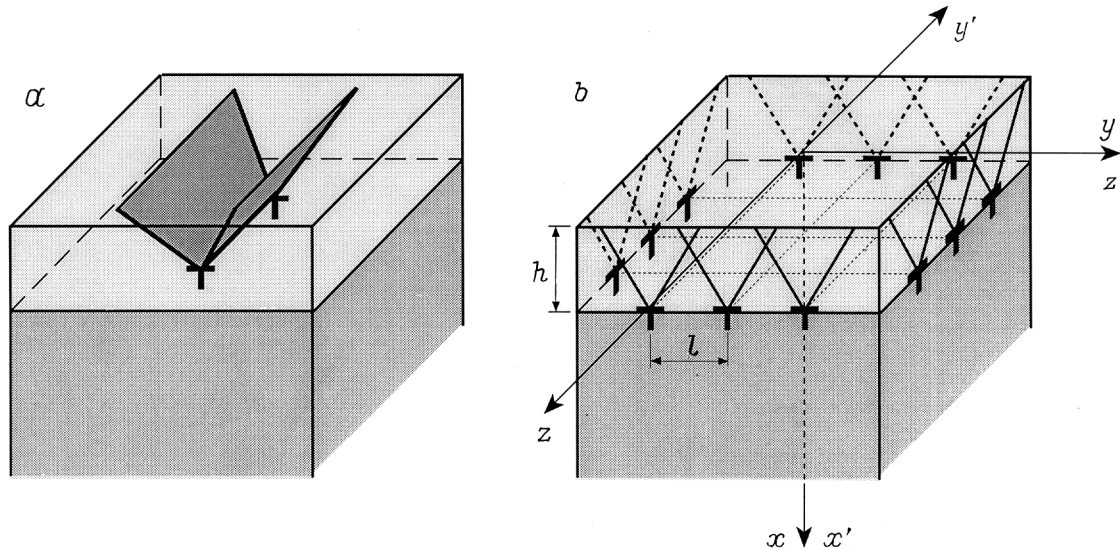
Проведен теоретический анализ энергетических характеристик ортогональных рядов частичных дислокаций несоответствия с  $V$ -образными дефектами упаковки в тонкопленочных гетероэпитаксиальных системах. Показано, что их появления следует ожидать только в очень тонких эпитаксиальных пленках наноскопической толщины и при больших значениях несоответствия, превышающих некоторую предельную величину. В этих условиях частичные дислокации несоответствия, связанные с  $V$ -образными дефектами упаковки, оказываются типичными элементами дефектной структуры нанослойных гетеросистем. При меньших несоответствиях и больших толщинах пленки следует ожидать образования полных дислокаций несоответствия.

Проблема дефектности тонкопленочных систем, получаемых различными методами гетероэпитаксии, уже около трех десятилетий остается одной из ключевых проблем полупроводникового материаловедения. Разнообразные дефектные структуры, появление которых служит эффективным каналом релаксации собственных упругих напряжений (напряжений несоответствия), обусловленных несоответствием структуры и свойств соединяемых материалов, формируются на стадии изготовления гетеросистемы и часто приводят к деградации основных характеристик приборов микро- и оптоэлектроники [1–6]. Наиболее распространенным способом релаксации напряжений несоответствия является образование дислокаций несоответствия (ДН), полных или частичных, которые формируют плоские дислокационные сетки, расположенные вблизи гетерограницы. Образование сеток полных ДН обычно более предпочтительно, поскольку, с одной стороны, они обладают большими векторами Бюргерса и поэтому более эффективно аккомодируют несоответствие кристаллических решеток контактирующих материалов, а с другой стороны, при этом не образуется дефектов упаковки в объеме материалов, т.е. вдали от гетерограницы материалы обладают большим структурным совершенством. Однако часто в гетеросистемах с большим несоответствием возникают ситуации, когда существующих источников полных дислокаций оказывается недостаточно для той степени аккомодации исходного несоответствия, которая является здесь наиболее энергетически предпочтительной. В таких случаях наблюдается действие так называемых "вторичных" механизмов релаксации [7], приводящих к появлению сеток частичных ДН (ЧДН). К образованию ЧДН также приводит один из основных механизмов зарождения ДН — зарождение на свободной поверхности растущей эпитаксиальной пленки и скольжение к гетерогранице полупетель расщепленных дислокаций [8–12].

Несмотря на то что ЧДН стали уже привычным объектом экспериментальных исследований, их теорети-

ческое описание в огромной мере уступает рассмотрению полных ДН. В частности, это относится к задаче определения равновесной плотности ДН и критических параметров гетеросистемы (критической толщины эпитаксиальной пленки  $h_c$  и критического несоответствия  $f_c$ , при которых образование ДН становится энергетически выгодным (соответственно для произвольного несоответствия  $f$  и для монослойной пленки). Решение этой задачи для случая полных ДН наиболее просто получается в рамках макроскопического квазиравновесного подхода [1,13–27], основная идея которого состоит в расчете полной энергии гетеросистемы с ДН и ее минимизации по плотности дислокационного ансамбля. Поэтому этот подход называют также энергетическим.

Обзор ранних работ, посвященных анализу равновесной плотности полных ДН в рамках энергетического подхода, содержится в [1]. Общим их недостатком являлось отсутствие в выражении для полной энергии слагаемых, описывающих энергии взаимодействия ДН с упругим полем исходного несоответствия, со свободной поверхностью эпитаксиальной пленки и между собой. Впервые комплексный учет этих членов для бесконечного дискретного ряда краевых ДН с векторами Бюргерса, лежащими в плоскости гетерограницы, был сделан в работах [14,15], основные результаты которых приведены также в [16]. Дальнейшее развитие макроскопический энергетический подход получил в серии работ [17–27]. Были рассмотрены ДН смешанного типа с вектором Бюргерса, наклоненным к плоскости гетерограницы, ортогональные сетки ДН, был сделан учет упругой анизотропии пленки и подложки и учтены небольшие различия в их упругих модулях [26]. Совокупность полученных в [17–27] результатов позволила приложить энергетический подход к анализу дислокационных структур в конкретных гетеросистемах с точным учетом геометрии и типа ДН. Тем не менее качественно результаты не изменились, а расхождение в теоретических оценках и экспериментальных данных оказалось того же порядка.



**Рис. 1.** Частичные дислокации несоответствия с  $V$ -образными дефектами упаковки.  $a$  — схема образования одной ЧДН,  $b$  — ортогональная сетка ЧДН.

Число теоретических расчетов для ЧДН оказалось существенно меньшим. Выделим работу [28], в которой образование ряда параллельных ЧДН теоретически исследовалось в рамках упрощенного энергетического подхода Мэтьюза [13], не учитывающего энергий взаимодействия дислокаций ни с полем напряжений исходного несоответствия, ни со свободной поверхностью эпитаксиальной пленки, ни между собой. Между тем, учет этих членов в случае полных ДН существенно сказывается на равновесной плотности ДН и на значениях критических параметров [14–16]. Естественно ожидать, что подобные поправки окажутся важными и для случая ЧДН.

Одним из способов образования ЧДН является зарождение на поверхности пленки и скольжение к границе раздела пленка–подложка частичных дислокаций смешанного типа. При достаточно высокой плотности поверхностных источников эти дислокации, доходя до гетерограницы, вступают в реакции с аналогичными дислокациями, скользящими по соседним плоскостям, и часто образуют “сидячие” ЧДН типа барьеров Ломера–Коттрелла [29]. Образованные таким образом ЧДН располагаются в вершинах  $V$ -образных дефектов упаковки (рис. 1,  $a$ ), что наблюдалось в экспериментах на гетеросистемах с решетками алмаза и сфалерита [8–12,30].

Таким образом, основная цель настоящей работы — теоретический анализ энергетических характеристик ансамбля ЧДН с  $V$ -образными дефектами упаковки с учетом указанных составляющих полной энергии, а также с учетом образования ортогональных рядов таких ЧДН. В качестве примера конкретной гетероструктуры рассматриваются эпитаксиальные пленки арсенида галлия на кремниевых подложках.

Для исследования качественных отличий в энергетике образования полных и частичных ДН рассмотрим про-

стейшую модель — тонкую упругоизотропную пленку толщиной  $h$ , полученную эпитаксиальным ростом на полубесконечной упругоизотропной подложке. Упругие константы, модуль сдвига  $G$  и коэффициент Пуассона  $\nu$  будем считать одинаковыми для материалов пленки и подложки.

Исходное когерентное (или псевдоморфное) состояние системы характеризуется величиной упругой деформации  $\varepsilon_1 = -f$ , где  $f = (a_2 - a_1)/a_1 > 0$  — исходное двумерное несоответствие параметров решетки подложки  $a_1$  и пленки  $a_2$ . Плотность собственной упругой энергии несоответствия (на единицу площади границы раздела) определяется выражением [1]

$$W^f = 2G \frac{1+\nu}{1-\nu} f^2 h. \quad (1)$$

С увеличением  $h$  до некоторого критического значения  $h_c$  в пленке начинается релаксация исходного несоответствия  $f$  путем зарождения на границе с подложкой ортогональной сетки ЧДН: система переходит в полукogerentное состояние (рис. 1,  $b$ ). Это новое состояние характеризуется величиной остаточной однородной упругой деформации  $\varepsilon_2 = -(f - \varepsilon_d) < 0$ , где  $\varepsilon_d = b/l$  — часть исходного несоответствия, аккомодируемая за счет введения ЧДН,  $b$  — величина вектора Бюргерса ЧДН,  $l$  — расстояние между ними. Плотность полной энергии системы в таком полукogerentном состоянии можно записать (по аналогии с расчетом в [14,15]) в виде

$$W = W^f + W_{el}^d + W_n^d + W_{int}^{fd} + W^\gamma, \quad (2)$$

где  $W_{el}^d$  — упругая энергия ЧДН, полученная с учетом их взаимодействия со свободной поверхностью пленки и между собой,  $W_n^d = Gb(f + \varepsilon_2)/[2\pi(1 - \nu)]$  — энергия

ядер ЧДН (в последующих выражениях мы опускаем индекс 2 в  $\varepsilon_2$ ),  $W_{\text{int}}^{fd} = -4Gf(f + \varepsilon)(h - b)(1 + \nu)/(1 - \nu)$  — энергия взаимодействия ЧДН с упругим полем исходного несоответствия,  $W^\gamma = 4\gamma h(f + \varepsilon)/(b \cos \alpha)$  — энергия V-образных конфигураций из полос дефектов упаковки,  $\gamma$  — энергия дефекта упаковки, а  $2\alpha$  — угол раствора V-образной конфигурации.

Упругая энергия дислокационной системы состоит из собственных энергий каждого из рядов ЧДН и энергии их взаимодействия

$$W_{\text{el}}^d = W_s + W_{\text{int}}. \quad (3)$$

Собственную энергию дислокационного ряда можно считать как работу по его зарождению в его собственном упругом поле [14,15]. Пусть один ряд ЧДН расположен вдоль оси  $Oy$  декартовой системы координат  $(x, y, z)$ , а второй — вдоль оси  $Oy'$  декартовой системы координат  $(x', y', z')$ , повернутой относительно первой на угол  $\pi/2$  таким образом, что справедливы соответствия  $x' \rightarrow x$ ,  $y' \rightarrow -z$ ,  $z' \rightarrow y$  (рис. 1, b). Тогда собственную энергию двух ортогональных рядов ЧДН можно записать в виде

$$W_s = \frac{Nb}{2} \int_0^{h-b} \sigma_{yy}^{(x,y,z)} dx + \frac{Nb}{2} \int_0^{h-b} \sigma_{y'y'}^{(x',y',z')} dx', \quad (4)$$

где  $N = 1/l$  — число ЧДН на единицу длины ряда,  $\sigma_{yy}^{(x,y,z)}$  — найденная в [14,15] и взятая здесь с обратным знаком компонента поля напряжений первого ряда в системе координат  $(x, y, z)$ ,  $\sigma_{y'y'}^{(x',y',z')}$  — компонента поля напряжений второго ряда в системе координат  $(x', y', z')$ . Переходя к системе координат  $(x, y, z)$ , имеем  $\sigma_{y'y'}^{(x',y',z')} = \sigma_{yy}^{(x,y,z)}$ , и выражение (4) сводится к виду

$$W_s = Nb \int_0^{h-b} \sigma_{yy}^{(x,y,z)} dx. \quad (5)$$

Энергию взаимодействия рядов можно рассчитать как работу по зарождению первого ряда в упругом поле второго

$$W_{\text{int}} = Nb \int_0^{h-b} \sigma_{z'z'}^{(x',y',z')} dx = Nb \int_0^{h-b} \sigma_{zz}^{(x,y,z)} dx. \quad (6)$$

Интегрируя с учетом координат ЧДН  $y = \pm nl$ , где  $n = 0, 1, 2, \dots$ , что дает  $\cos(2\pi y/l) = 1$  в выражениях для  $\sigma_{ij}^{(x,y,z)}$ , находим

$$W_s = \frac{Gb}{2(1 - \nu)} (f + \varepsilon)^2 \left\{ \left( \frac{2h}{b} - 1 \right) \frac{C_1 + 1}{S_1} - \frac{C_2 + 1}{S_2} - \frac{h}{b} \left( \frac{h}{b} - 1 \right) \frac{4\pi(f + \varepsilon)}{C_1 - 1} - \frac{1}{2\pi(f + \varepsilon)} \ln \frac{C_2 - 1}{C_1 - 1} \right\}, \quad (7)$$

$$W_{\text{int}} = \frac{Gb\nu}{2(1 - \nu)} (f + \varepsilon)^2 \left\{ 4 \frac{h}{b} \left( \frac{C_1 + 1}{S_1} - \frac{C_3 + 1}{S_3} \right) - \frac{1}{\pi(f + \varepsilon)} \ln \frac{C_2 - 1}{C_1 - 1} \right\}, \quad (8)$$

где

$$C_1 = \cosh[2\pi(f + \varepsilon)(2h/b - 1)], \quad C_2 = \cosh[2\pi(f + \varepsilon)],$$

$$C_3 = \cosh[2\pi(f + \varepsilon)h/b],$$

$$S_1 = \sinh[2\pi(f + \varepsilon)(2h/b - 1)], \quad S_2 = \sinh[2\pi(f + \varepsilon)],$$

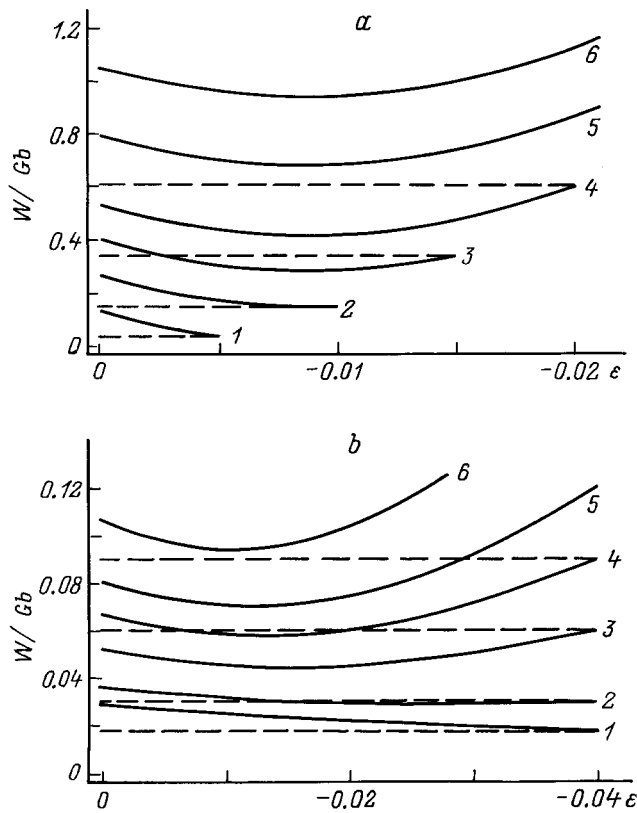
$$S_3 = \sinh[2\pi(f + \varepsilon)h/b].$$

Подставляя (7) и (8) в (3), получаем

$$W_{\text{el}}^d = \frac{Gb}{2(1 - \nu)} (f + \varepsilon)^2 \left\{ \left( 2(1 + 2\nu) \frac{h}{b} - 1 \right) \frac{C_1 + 1}{S_1} - \frac{C_2 + 1}{S_2} - 4\nu \frac{h}{b} \frac{C_3 + 1}{S_3} - 4\pi \frac{h}{b} \left( \frac{h}{b} - 1 \right) \frac{f + \varepsilon}{C_1 - 1} - \frac{1 + 2\nu}{2\pi(f + \varepsilon)} \ln \frac{C_2 - 1}{C_1 - 1} \right\}. \quad (9)$$

Численная обработка полученного в результате выражения для полной энергии (2) с учетом (1) и (9) проводилась для значений параметров  $G = 32.5$  GPa,  $\nu = 0.31$ ,  $2\alpha \approx 70^\circ$  и  $\gamma = 0.06$  J/m<sup>2</sup>, характерных для гетеросистемы GaAs/Si(001) [28,31]. Например, в гетерогранице с ориентацией (001) вектор Бюргера ЧДН  $\mathbf{b} = \frac{a}{6}[1\bar{1}0]$  может формироваться при объединении двух частичных  $30^\circ$  дислокаций Шокли, одна из которых скользит в пленке по плоскости  $(1\bar{1}1)$  и может иметь вектор Бюргера  $\mathbf{b}_1 = \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{2}1]$  или  $\frac{a}{6}[2\bar{1}1]$ , а другая — по плоскости  $(\bar{1}11)$  и может иметь  $\mathbf{b}_2 = \frac{a}{6}[211]$  или  $\frac{a}{6}[\bar{1}\bar{2}1]$ . Здесь  $a$  — межатомное расстояние вдоль направления [001], равное, например, 0.5635 nm в GaAs. В результате дислокационной реакции винтовые компоненты этих частичных дислокаций аннигилируют, что приводит к образованию сидячей чисто краевой ЧДН, линия которой лежит в плоскости границы раздела (001). В случае пленки GaAs по обычной формуле  $|\mathbf{b}| = \frac{a}{6}\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$  при  $\mathbf{b} = \frac{a}{6}[hkl]$  получаем значения векторов Бюргера частичных дислокаций, участвующих в таких реакциях:  $b = 0.133$  nm,  $b_1 = b_2 = 0.23$  nm.

На рис. 2 приведены зависимости  $W(\varepsilon)$  при фиксированной толщине пленки  $h = 400b$  и разных исходных несоответствиях  $f$ , а также при фиксированном несоответствии  $f = 0.04$  и разных толщинах  $h$ . Штриховыми линиями показаны прямые  $W(\varepsilon = -f)$ , соответствующие когерентному состоянию гетеросистемы — отсутствию в ней ЧДН. Видно, что при малых  $f$  и  $h$  (кривые 1 на рис. 2) энергия когерентного состояния меньше энергии релаксированного,  $W(f) < W(\varepsilon)$ , т.е. образование ЧДН энергетически невыгодно. При некоторых критических значениях  $f$  и  $h$  (кривые 2 на рис. 2) на кривых появляются участки, где  $W(f) > W(\varepsilon)$  — зарождение ЧДН становится энергетически выгодным. Деформация



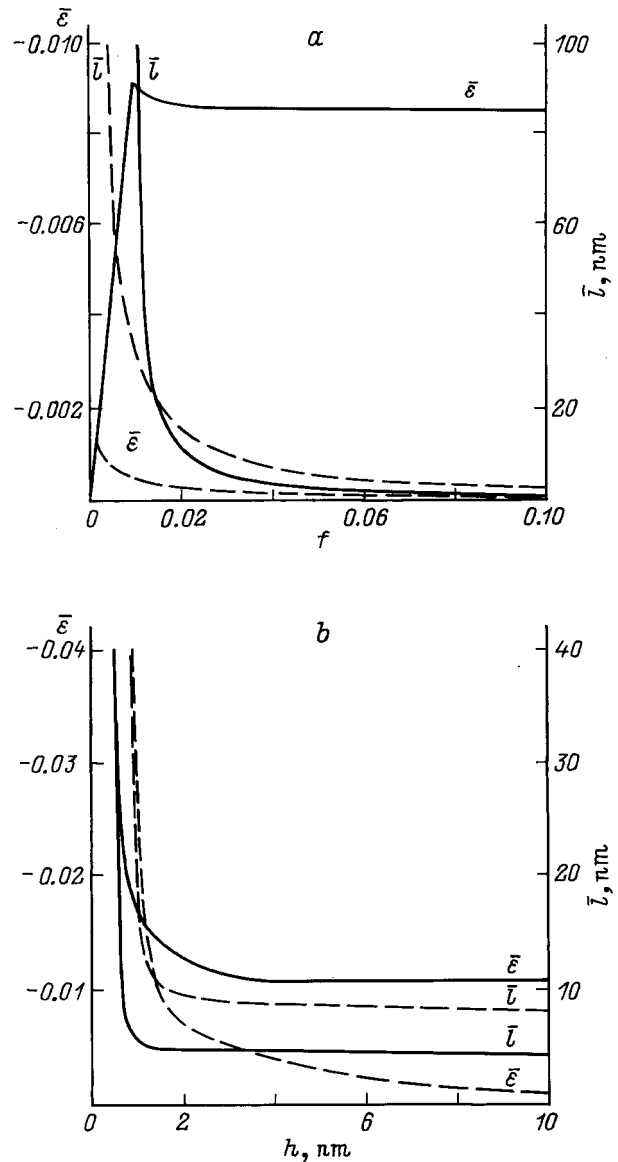
**Рис. 2.** Зависимость плотности полной энергии гетеросистемы  $W$  от остаточной однородной упругой деформации в пленке  $\varepsilon$ . *a)*  $h/b = 400$  и  $f \cdot 10^2 = 0.5$  (1), 1 (2), 1.5 (3), 2 (4), 3 (5), 4 (6); *b)*  $f = 0.04$  и  $h/b = 3$  (1), 5 (2), 10 (3), 15 (4), 20 (5), 30 (6). Горизонтальные штриховые линии соответствуют значениям  $W(\varepsilon = -f)$  для когерентного состояния системы.

$\varepsilon = \bar{\varepsilon}$ , соответствующая минимуму на кривой  $W(\varepsilon)$ , является равновесной остаточной упругой деформацией, однородной по сечению пленки. Тогда сумма  $f + \bar{\varepsilon}$ , представляющая собой ту часть исходного несоответствия, которая снимается при образовании ЧДН, определяет равновесное расстояние между ними  $\bar{l} = b(f + \bar{\varepsilon})$ . По мере дальнейшего увеличения  $f$  и  $h$  значения  $|\bar{\varepsilon}|$  и  $\bar{l}$  уменьшаются: ансамбль ЧДН уплотняется и аккомодирует большую часть исходного несоответствия  $f$ .

Представленные на рис. 2 кривые  $W(\varepsilon)$ , описывающие энергетику гетеросистемы с ЧДН, качественно хорошо согласуются с аналогичными кривыми, полученными в [14–16] для полных ДН (ПДН). Однако количественные расхождения оказываются весьма велики. Положив  $\gamma = 0$  в (2) и взяв  $b = 0.385$  nm (вектор Бюргера полной  $90^\circ$  ДН  $a_{\text{Si}}/2\langle 110 \rangle$ , лежащей в гетерогранице (001) вдоль направлений  $[110]$  или  $[1\bar{1}0]$  [12]), получим выражение для полной энергии системы с двумя ортогональными рядами ПДН. Анализ кривых  $W(\varepsilon)$  для ЧДН и ПДН позволяет провести сравнение характерных особенностей формирования их ансамблей.

На рис. 3 показаны зависимости  $\bar{\varepsilon}$  и  $\bar{l}$  от несоответствия  $f$  при фиксированной толщине пленки

$h = 400b \approx 53.2$  nm (здесь взято  $b = 0.133$  nm — вектор Бюргера ЧДН) и от толщины  $h$  при фиксированном  $f = 0.04$  (характерном для гетеросистемы GaAs/Si). Сплошными линиями показаны кривые для ЧДН, штриховыми — для ПДН. Видно, что при малых значениях  $f$  зависимости  $\bar{\varepsilon}(f)$  линейны ( $\bar{\varepsilon}(f) = -f$ , рис. 3, *a*), а при малых  $h$  равновесная деформация  $\bar{\varepsilon}(h)$  постоянна и также равна  $-f$  (рис. 3, *b*), что отвечает чисто упругой аккомодации несоответствия и отсутствию ДН на гетерогранице ( $\bar{l} = \infty$ ). Как только  $f$  или  $h$  достигают своих критических значений  $f_c$  и  $h_c$  (при

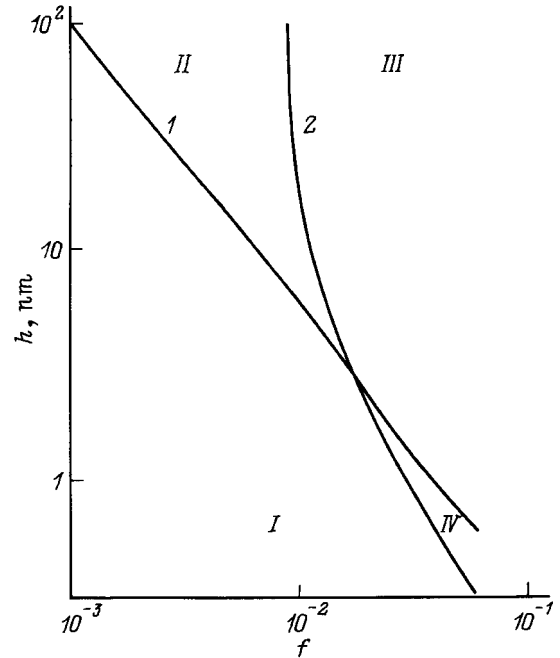


**Рис. 3.** Зависимости равновесной однородной упругой деформации пленки  $\bar{\varepsilon}$  и равновесного расстояния между дислокациями несоответствия  $\bar{l}$  от величины исходного несоответствия  $f$  при  $h = 400b \approx 53.2$  nm (*a*) и от толщины эпитаксиальной пленки  $h$  при  $f = 0.04$  (*b*). Сплошными линиями показаны кривые для частичных, а штриховыми — для полных дислокаций несоответствия.

заданных  $h$  или  $f$  соответственно), происходит пластическая релаксация — зарождение ДН, и равновесная однородная упругая деформация  $|\bar{\varepsilon}|$  резко снижается при  $f > f_c$  (рис. 3, *a*) и при  $h > h_c$  (рис. 3, *b*). Соответственно становится конечным и уменьшается и равновесное расстояние между ДН  $\bar{l}$ . Важно отметить, что при выбранной толщине  $h \approx 53.2$  nm критическое несоответствие  $f_c$  оказывается в 5 раз меньшим для ПДН ( $\sim 0.002$ ), чем для ЧДН ( $\sim 0.01$ ). При этом спадающие кривые  $\bar{\varepsilon}(f)$  (рис. 3, *a*) быстро выходят на насыщение, уровень которого по модулю почти на два порядка меньше для ПДН ( $\sim 1 \cdot 10^{-4}$ ), чем для ЧДН ( $\sim 85 \cdot 10^{-4}$ ), т. е. при такой толщине пленки ПДН обеспечивают гораздо более полную аккомодацию несоответствия, чем ЧДН. Интересно, что при этом равновесные расстояния между ПДН оказываются примерно в 2 раза большими, чем между ЧДН.

В свою очередь при выбранном несоответствии  $f = 0.04$  критическая толщина пленки  $h_c$  (рис. 3, *b*) оказывается примерно в 1.6 раза меньше для ЧДН ( $\sim 0.6$  nm), чем для ПДН ( $\sim 0.96$  nm). Это означает, что по мере роста эпитаксиальной пленки при таком несоответствии (например, пленки GaAs на кремниевой подложке) сначала должны зародиться ЧДН, а уже потом ПДН. Именно такая последовательность появления ЧДН и ПДН наблюдалась в гетеросистемах GaAs/Si [11,12] и Pd/Au ( $f \approx 0.046$ ) [32,33].

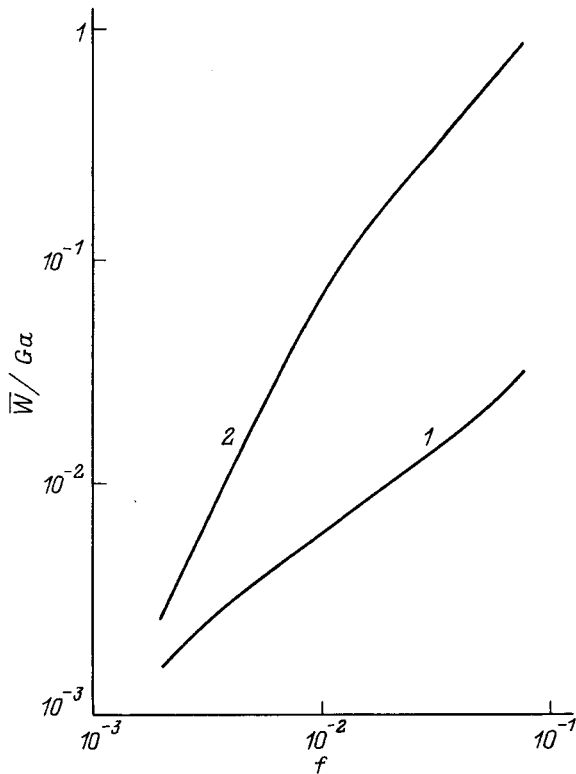
Более полное представление о возможных режимах заполнения гетерограницы ПДН и ЧДН в широком диапазоне несоответствий  $f$  и толщин  $h$  дает диаграмма на рис. 4, полученная с помощью зависимостей  $h_c(f)$  для ПДН (кривая 1) и ЧДН (кривая 2). Пересекающиеся кривые 1 и 2 делят фазовое пространство  $(f, h)$  на четыре области с различной дефектной структурой гетерограницы. Область I, ограниченная верхней частью кривой 1 и нижней частью кривой 2, соответствует когерентному состоянию системы и отсутствию в ней ДН. Область II, ограниченная верхними частями кривых 1 и 2, отвечает наличию на гетерогранице ПДН. Область III, ограниченная нижней частью кривой 1 и верхней частью кривой 2, соответствует совместному существованию ПДН и ЧДН. Наконец, область IV, ограниченная нижними частями кривых 1 и 2, представляет собой область образования ЧДН. Видно, что кривые 1 и 2 обладают существенным отличием: зависимость  $h_c(f)$  для ПДН (кривая 1) не имеет асимптот, а для ЧДН (кривая 2) имеет вертикальную асимптоту в точке  $f \approx 9 \cdot 10^{-3}$ . Это означает, что в случае ПДН всегда должна существовать некоторая критическая толщина  $h_c$  для любого, сколь угодно малого,  $f$ , т. е. в любой гетеросистеме можно дорастить пленку на полубесконечной подложке до такой толщины, что зарождение ПДН станет энергетически выгодным. В случае же ЧДН это не так: существует такое предельное несоответствие  $f_i$  ( $f_i \approx 9 \cdot 10^{-3}$  для выбранных расчетных параметров), что при  $f < f_i$  образование ЧДН будет оставаться энергетически невыгодным при любых толщинах пленки. Заметим также, что диапазон толщин



**Рис. 4.** Диаграмма  $f-h$ , полученная с помощью зависимостей  $h_c(f)$  для полных (1) и частичных (2) дислокаций несоответствия. Выделены четыре области: I — когерентное состояние системы, II–IV — полные, полные и частичные, частичные дислокации несоответствия на гетерогранице соответственно.

пленки  $\Delta h$ , при которых зарождение ЧДН оказывается выгоднее зарождения ПДН, оказался чрезвычайно узким, здесь  $\Delta h \leq 0.3$  nm. Поэтому наблюдать аккомодацию несоответствия путем образования только ЧДН должно быть чрезвычайно трудно. В большинстве случаев должны наблюдаться либо ПДН, либо одновременно ПДН и ЧДН, причем чем больше несоответствие и толще пленка, тем меньшую долю должны составлять ЧДН. Подобное наблюдение содержится в экспериментальной работе [12], где приведены процентные доли ПДН и ЧДН (а также 60° ДН, которые мы здесь не рассматриваем) в зависимости от толщины пленки. Это объясняется как низкой эффективностью ЧДН с точки зрения глубины релаксации исходного несоответствия из-за меньшей величины их вектора Бюргера (рис. 3), так и большим вкладом энергии дефекта упаковки в полную энергию системы.

На рис. 5 приведены зависимости равновесной полной энергии системы  $\bar{W}$  от несоответствия  $f$  для системы с ПДН ( $\bar{W}^{(1)}(f)$ , кривая 1) и с ЧДН ( $\bar{W}^{(2)}(f)$ , кривая 2) при толщине пленки  $h = 100$  nm. Начальная часть кривой 2 при  $f \leq f_c = f_i \approx 9 \cdot 10^{-3}$  полностью определяется выражением (1) и разность  $\bar{W}^{(2)}(f) - \bar{W}^{(1)}(f)$  характеризует здесь выигрыш в энергии за счет введения ПДН. В области  $f > f_c = f_i \approx 9 \cdot 10^{-3}$  эта разность показывает энергетический выигрыш от образования ПДН вместо ЧДН. В данном случае он составляет величину  $\approx 0.06$  Ga  $\approx 1.1$  J/m<sup>2</sup>, и  $\bar{W}^{(2)}(f)$  превышает  $\bar{W}^{(1)}(f)$  более чем на порядок.



**Рис. 5.** Зависимость равновесной полной энергии системы  $\bar{W}$  от несоответствия  $f$  для системы с полными (1) и с частичными (2) дислокациями несоответствия при толщине пленки  $h = 100$  nm.

Таким образом, выбранная нами модель ЧДН, залегающих в вершинах  $V$ -образных дефектов упаковки, которые пронизывают пленку насквозь, от гетерограницы до свободной поверхности, приводит к крайне малой вероятности наблюдения подобных дефектных конфигураций в достаточно толстых ( $h \approx 10$  nm и более) пленках. Проведенные расчеты показывают, что их появления следует ожидать только в очень тонких эпитаксиальных пленках наноскопической толщины и при больших значениях несоответствия ( $f > 0.01$ ). В этих условиях ЧДН, связанные с  $V$ -образными дефектами упаковки, оказываются типичными элементами дефектной структуры нанослойных гетероструктур, наблюдаемыми на эксперименте [11,12]. При меньших  $f$  и больших  $h$  следует ожидать образования ПДН или ЧДН, связанных дефектами упаковки с частичными дислокациями, расположенными в объеме пленки вне гетерограницы. Исследование роли и места подобных образований в процессах аккомодации несоответствия при гетероэпитаксии составляет предмет дальнейших исследований авторов настоящей работы.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 98-02-16075) и Научного совета по МНТП России "Физика твердотельных наноструктур" (грант 97-3006).

## Список литературы

- [1] Ю.А. Тхорик, Л.С. Хазан. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Наук. думка, Киев (1983). 304 с.
- [2] М.Г. Мильвидский, В.Б. Освенский. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников. Металлургия, М. (1985). 160 с.
- [3] W.D. Nix. Metall. Trans. **A20**, 11, 2217 (1989).
- [4] S.C. Jain, J.R. Willis, R. Bullough. Adv. Phys. **39**, 2, 127 (1990).
- [5] S.C. Jain, W. Hayes. Semicond. Sci. Technol. **6**, 7, 547 (1991).
- [6] E.A. Fitzgerald. Mater. Sci. Rep. **7**, 1, 87 (1991).
- [7] N. Burle, B. Pichaud, N. Guelton, R.G. Saint-Jacques. Phys. Stat. Sol. (a) **149**, 1, 123 (1996).
- [8] B.C. De Cooman, C.B. Carter. Acta Met. **37**, 10, 2765 (1989).
- [9] B.C. De Cooman, C.B. Carter, Kam Toi Chan, J.R. Shealy. Acta Met. **37**, 10, 2779 (1989).
- [10] J. Zou, D.J.H. Cockayne. Appl. Phys. Lett. **69**, 8, 1083 (1996).
- [11] M. Loubradou, R. Bonnet, A. Vila, P. Ruterana. Mater. Sci. Forum. **207-209**, 1, 285 (1996).
- [12] M. Tamura. Appl. Phys. **A63**, 2, 359 (1996).
- [13] J.W. Matthews. J. Vacuum Sci. Technol. **12**, 1, 126 (1975).
- [14] В.И. Владимиров, М.Ю. Гуткин, А.Е. Романов. В сб.: Физические аспекты прогнозирования разрушения и деформирования гетерогенных материалов / Под ред. А.М. Лексовского. Изд-во ФТИ, Л. (1987). С. 76.
- [15] В.И. Владимиров, М.Ю. Гуткин, А.Е. Романов. Поверхность. Физика, химия, механика, **6**, 46 (1988).
- [16] M.Yu. Gutkin, A.L. Kolesnikova, A.E. Romanov. Mater. Sci. Eng. **A164**, 1-2, 433 (1993).
- [17] J.R. Willis, S.C. Jain, R. Bullough. Phil. Mag. **A62**, 1, 115 (1990).
- [18] A. Rocket, C.J. Kiely. Phys. Rev. **B44**, 3, 1154 (1991).
- [19] A. Atkinson, S.C. Jain. Thin Solid Films **222**, 1-2, 161 (1992).
- [20] A. Atkinson, S.C. Jain. J. Appl. Phys. **72**, 6, 2242 (1992).
- [21] T.J. Gosling, S.C. Jain, J.R. Willis, A. Atkinson, R. Bullough. Phil. Mag. **A66**, 1, 119 (1992).
- [22] S.C. Jain, T.J. Gosling, J.R. Willis, R. Bullough, P. Balk. Solid State Electron. **35**, 8, 1073 (1992).
- [23] S.C. Jain, T.J. Gosling, J.R. Willis, D.H.J. Totterdell, R. Bullough. Phil. Mag. **A65**, 5, 1151 (1992).
- [24] T.J. Gosling, R. Bullough, S.C. Jain, J.R. Willis. J. Appl. Phys. **73**, 12, 8267 (1993).
- [25] U. Jain, S.C. Jain, J. Nijs, J.R. Willis, R. Bullough, R.P. Mertens, R. Van Oversaeten. Solid State Electron. **36**, 3, 331 (1993).
- [26] T.J. Gosling, J.R. Willis. Phil. Mag. **A69**, 1, 65 (1994).
- [27] F. Bailly, M. Barbé, G. Cohen-Solal. J. Cryst. Growth **153**, 1, 115 (1995).
- [28] А.К. Гутаковский, О.П. Пчеляков, С.И. Стенин. Кристаллография **25**, 4, 806 (1980).
- [29] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [30] Дефекты в кристаллах полупроводников. Мир, М. (1969). 376 с.
- [31] J. Zou, B.F. Usher, D.J.H. Cockayne, R. Glaisher. J. Electron. Mater. **20**, 10, 855 (1991).
- [32] D. Cherns, M.J. Stowell. Thin Solid Film. **29**, 1, 107 (1975).
- [33] D. Cherns, M.J. Stowell. Thin Solid Film. **37**, 2, 249 (1976).