

05

## Диполи дислокаций несоответствия в нанопленках с периодической модуляцией состава

© И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман

Институт проблем машиноведения РАН, С.-Петербург  
E-mail: ovidko@def.ipme.ru

Поступило в Редакцию 30 октября 2001 г.

Предложена модель, описывающая новый тип конфигурации дефектов несоответствия — дислокационных диполей в нанопленках с периодической модуляцией химического состава. Рассчитаны критические толщины композиционно-неоднородных пленок, при превышении которых формирование в них дислокаций несоответствия или их диполей становится энергетически выгодным. Показано, что критическая толщина зарождения дислокационных диполей может быть меньше критической толщины зарождения дислокаций несоответствия.

Наномасштабные пленки с периодически модулированным химическим составом являются перспективными материалами для создания современных приборов нано- и оптоэлектроники (например, [1]). Как и в пленках с постоянным составом, в композиционно-неоднородных пленках различие параметров кристаллических решеток пленок и подложек вызывает наличие в пленках внутренних напряжений — напряжений несоответствия. В пленках с постоянным составом напряжения несоответствия чаще всего релаксируют за счет образования в этих пленках дислокаций несоответствия (ДН) (например, [2–4]). В композиционно-неоднородных пленках модуляция состава приводит к пространственным осцилляциям параметра кристаллической решетки. В случае, если средний параметр решетки пленки с переменным составом совпадает с параметром кристаллической решетки подложки, в такой пленке возникают напряжения несоответствия переменного знака [5,6]. Эффективным механизмом их релаксации представляется зарождение в пленке конфигураций дефектов несоответствия нового типа — дислокационных диполей. Так, дислокационные диполи в композиционно-неоднородной пленке  $Ga_{0.5}In_{0.5}P$  наблюдались в эксперименте [7]. (Подобные кон-

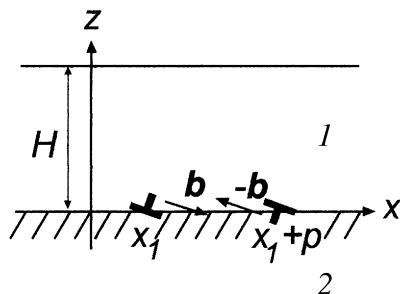


Рис. 1. Дислокационный диполь на границе подложки (2) и пленки (1).

фигурации эффективно аккомодируют напряжения несоответствия и в нанокристаллических пленках с постоянным химическим составом [8]. В настоящей работе предлагается теоретическая модель диполей ДН и проведен расчет критических параметров формирования ДН и их диполей в пленках с неоднородным составом.

Рассмотрим изолированный диполь краевых дислокаций с векторами Бюргерса  $\mathbf{b}$  и  $-\mathbf{b}$ , расположенных на межфазной границе полубесконечной подложки и пленки толщиной  $H$  на расстоянии  $p$  друг от друга (рис. 1). Для определенности мы рассмотрим диполи  $60^\circ$ - и  $90^\circ$ -ных ДН, наблюдавшиеся в пленках  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$  [7]. Для расчета параметров зарождения в пленке диполя ДН воспользуемся следующими предположениями модели [5], описывающей неоднородности состава в пленках, свободных от ДН: 1) Пленка и подложка являются упругоизотропными твердыми телами, имеют кубические кристаллические решетки и характеризуются одинаковыми модулями сдвига  $G$  и коэффициентами Пуассона  $\nu$ . 2) Средний параметр кристаллической решетки пленки совпадает с параметром кристаллической решетки подложки. 3) Модуляция состава одинакова по всей толщине пленки. 4) Параметр кристаллической решетки  $a$  пленки имеет синусоидальную зависимость от координаты  $x$  вдоль границы пленка–подложка, а именно:

$$a = a_0(1 - \varepsilon_0 \cos \alpha x), \quad (1)$$

где  $a_0$  — параметр кристаллической решетки подложки, а  $\varepsilon_0$  и  $\alpha$  — соответственно амплитуда и частота модуляции. Частота  $\alpha$  модуляции

состава пленки определяется из условия минимума упругой энергии системы пленка–подложка, связанной с несоответствием параметров кристаллической решетки пленки и подложки. При указанных предположениях напряжения несоответствия (связанного с модуляцией параметра кристаллической решетки пленки) рассчитываются согласно [5].

Определим условия, при которых зарождение диполя ДН на межфазной границе пленка–подложка энергетически выгодно. Для этого сравним энергии системы без диполя ДН с энергией системы, содержащей такой диполь. В отсутствие ДН энергия системы включает только энергию упругих деформаций несоответствия. При формировании в пленке изолированного диполя ДН энергия  $W$  такой системы (на единицу длины ДН) состоит из четырех слагаемых:

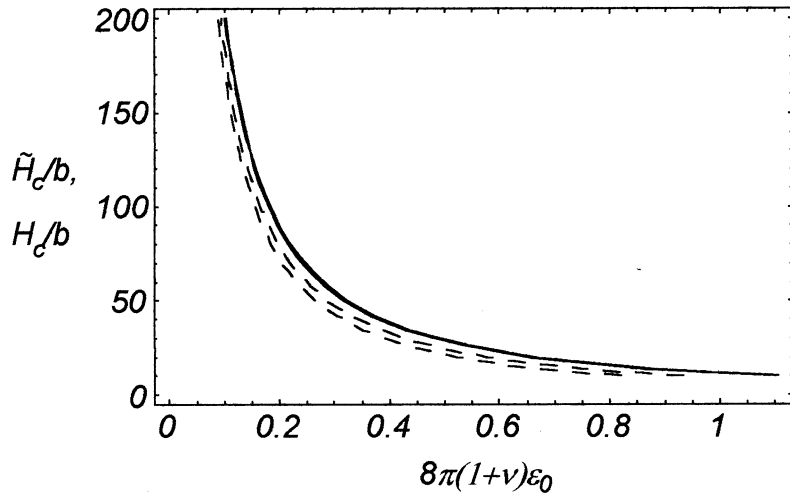
$$W = W^0 + W^{dip} + W^{dip-f} + 2W^c, \quad (2)$$

где  $W^0$  — энергия упругих деформаций несоответствия (на единицу длины ДН),  $W^{dip}$  — собственная энергия диполя ДН,  $W^{dip-f}$  энергия его взаимодействия с упругими полями напряжений несоответствия, а  $W^c$  — энергия ядра дислокации. Зарождение диполя ДН энергетически выгодно, если оно ведет к уменьшению полной энергии, т.е. если  $W - W^0 < 0$ . С учетом (2) это условие можно переписать в виде

$$W^{dip} + W^{dip-f} + 2W^c < 0. \quad (3)$$

Для расчета энергии  $W^{dip}$  дислокационного диполя, изображенного на рис. 1, мы использовали функции напряжений [9] для краевой дислокации вблизи свободной поверхности. Для расчета энергии  $W^{dip-f}$  мы использовали точные формулы [5] для поля напряжений несоответствия в пленке с периодически модулированным составом. Согласно [10], энергия ядра дислокации  $W^c \approx Gb^2/[4\pi(1-\nu)]$ . Подставляя эту формулу для  $W^c$  и полученные выражения для  $W^{dip}$  и  $W^{dip-f}$  в формулу (3), имеем следующий критерий зарождения диполя ДН:  $H > H_c$ , где критическая толщина пленки  $H_c$  определяется из условия:

$$8\pi(1+\nu)f_e = \frac{b_x}{H_c} \left\{ \frac{(1+(b_z/b_x)^2)}{2} \left[ \ln \frac{2H_c}{b} - \ln \frac{p^2 + 4H_c^2}{p^2} + 1 \right] + \frac{2H_c^2[(b_z/b_x)^2(12H_c^2 + p^2) - (4H_c^2 + 3p^2)]}{(4H_c^2 + p^2)^2} \right\}. \quad (4)$$



**Рис. 2.** Зависимости критической толщины  $\tilde{H}_c/b$  зарождения одиночных дислокаций несоответствия от  $\epsilon_0$  (непрерывные кривые, которые на графике сливаются в одну кривую) и критической толщины  $H_c/b$  зарождения  $90^\circ$ -ных (нижняя штриховая кривая) и  $60^\circ$ -ных (верхняя штриховая кривая) дислокационных диполей от  $\epsilon_0$ .

В формуле (4)  $f_e = \epsilon_0(0.158 + 0.0047b_z/b_x) \sin \pi p/T$ , а  $T = 2\pi/\alpha$  — период модуляции параметра кристаллической решетки пленки. Анализ формулы (4) показывает, что критическая толщина  $H_c$  имеет минимум при  $p = T/2$ .

Уравнение для определения критической толщины  $\tilde{H}_c$  (при превышении которой на границе пленки и подложки возможно зарождение одиночной ДН) получается таким же образом, как и уравнение (4) для определения  $H_c$ . Зависимости критических толщин  $\tilde{H}_c$  и  $H_c$  зарождения одиночных  $90^\circ$ - и  $60^\circ$ -ных ДН и их диполей на границе пленка-подложка от параметра  $8\pi(1+\nu)\epsilon_0$  приведены для случая  $p = T/2$  на рис. 2. На этом рисунке кривые  $\tilde{H}_c(\epsilon_0)$ , показанные непрерывными линиями, сливаются. Из рис. 2 можно сделать следующие выводы. Во-первых, в пленках с периодической модуляцией состава критические толщины  $\tilde{H}_c$  и  $H_c$  зарождения одиночных ДН и их диполей уменьшаются с уве-

личением амплитуды  $\varepsilon_0$  модуляции. Во-вторых, критические толщины  $\tilde{H}_c$  и  $H_c$  образования диполя  $90^\circ$ -ных ДН меньше соответствующих критических толщин зарождения диполя ДН  $60^\circ$ -го типа. В-третьих, в пленках с модуляцией состава критическая толщина  $\tilde{H}_c$  зарождения одиночных ДН больше критической толщины  $H_c$  формирования диполей таких ДН. Таким образом, при малой толщине пленки ( $H < H_c$ ) ДН и их диполи заданного ( $60^\circ$ - или  $90^\circ$ -ного) типа в пленке не образуются. При увеличении толщины пленки ( $H_c < H < \tilde{H}_c$ ) возможно образование диполей ДН. При дальнейшем росте толщины пленки становится возможным зарождение как одиночных ДН, так и их диполей. Кроме того, расчеты свидетельствуют о том, что формирование диполей ДН в композиционно-неоднородных пленках энергетически более выгодно, чем формирование одиночных ДН. Это заключение находится в соответствии с экспериментальными данными [7] по наблюдению дислокационных диполей в наномасштабных пленках  $\text{Ga}_{0,5}\text{In}_{0,5}\text{P}$  с модуляцией состава.

Таким образом, в настоящей работе проведен теоретический анализ условий формирования дислокаций несоответствия и их диполей в пленках с неоднородным составом. Показано, что в композиционно-неоднородных пленках критическая толщина и энергия образования дислокационных диполей меньше критической толщины (соответственно энергии) образования одиночных дислокаций несоответствия. Следовательно, дислокационные диполи могут являться типичными элементами дефектной структуры пленок с неоднородным составом, что соответствует экспериментальным данным [7].

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 01-02-16853), Офиса морских исследований США (the Office of US Naval Research; грант N00014-01-1-1020) и ИНТАС (грант 99-1216).

## Список литературы

- [1] Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Щукин В.А., Копьев П.С., Алфёров Ж.И., Бимберг Д. // ФТП. 1998. V. 32. № 4. P. 385–410.
- [2] Gosling T.J., Bullough R., Jain S.C., Willis J.R. // J. Appl. Phys. 1993. V. 73. N 12. P. 8267–78.

- [3] *Jain S.C., Harker A.H., Cowley R.A.* // *Phil Mag.* A. 1997. V. 75. N 6. P. 1461–1515.
- [4] *Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G.* // *J. Phys.: Cond. Matter.* 2000. V. 12. N 25. P. 5391–5401.
- [5] *Glas F.* // *J. Appl. Phys.* 1987. V. 62. N 8. P. 3201–3208.
- [6] *Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G.* // *J. Phys.: Cond Matter.* 2001. V. 13. N 42. P. 9645–9653.
- [7] *Wang Q., Wang Z.L., Brown T., Brown A.* et al. // *Appl. Phys. Lett.* 2000. V. 77. N 2. P. 223–225.
- [8] *Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G.* // *J. Nanosci. Nanotechnol.* 2001. V. 1. N 2. P. 215–220.
- [9] *Dundurs J.* // *Recent Advances in Engineering Science* / Ed. by A.C. Eringen. V. 2. New York: Gordon & Breach, 1967. P. 223–233.
- [10] *Хурт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1974.