

Динамика проникающих дислокаций в пористых гетероэпитаксиальных пленках GaN

© М.Ю. Гуткин^{1–3}, Е.А. Ржавцев¹

¹ Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

³ Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: m.y.gutkin@gmail.com

(Поступила в Редакцию 23 мая 2017 г.)

С помощью компьютерного моделирования методом двумерной дискретной динамики дислокаций исследовано поведение проникающих дислокаций в пористых гетероэпитаксиальных пленках нитрида галлия (GaN). Использована расчетная схема, в которой поры моделировались сечениями цилиндрических полостей, упруго взаимодействующих с однонаправленными параллельными краевыми дислокациями, имитирующими проникающие дислокации. Получены временные зависимости координат и скоростей каждой дислокации из исследованных дислокационных ансамблей. Выполнена визуализация текущей структуры дислокационного ансамбля в виде карты расположения дислокаций в любой момент времени. Показано, что плотность возникающих дислокационных структур существенно зависит от отношения площади поперечного сечения поры к площади области моделирования. В частности, увеличение доли поверхности пор на поверхности слоя до 2% должно приводить к снижению конечной плотности проникающих дислокаций примерно в 1.5 раза, а увеличение этой доли до 15% — примерно в 4.5 раза.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (грант № 3.3194.2017/PCh).

DOI: 10.21883/FTT.2017.12.45233.164

1. Введение

Полупроводниковые гетероструктуры на основе нитрида галлия (GaN), полученные эпитаксиальным ростом, широко используются в современных электронных и оптоэлектронных приборах [1–8]. Качество выращенного кристалла GaN сильно зависит от выбора подложки. В настоящее время в основном используются подложки, изготовленные из других кристаллов, обладающих решеточным несоответствием относительно кристаллической решетки GaN. Это несоответствие вызывает в растущем слое значительные напряжения несоответствия, релаксация которых сопровождается прорастанием в этот слой проникающих дислокаций (ПД). ПД оказывают существенное негативное воздействие на проводящие и оптоэлектронные свойства гетероструктур, полученных на основе III-нитридных полупроводников [9,10], так что уменьшение их плотности является важной научной и технологической задачей.

Эффективным методом снижения плотности ПД может служить формирование промежуточных пористых слоев GaN, которые затем зарастаются сплошными слоями. Из экспериментов известно, что применение пористых подложек приводит к значительному снижению плотности ПД в растущих пленках GaN [11–14]. Тем не менее в настоящее время отсутствует пол-

ное понимание влияния пористости на эволюцию ПД в зарощенном слое GaN. Только в самые последние годы появились первые физические модели, развитые на основе реакционно-кинетической модели поведения дислокаций [15,16] и описывающие эволюцию плотности ПД в таких слоях [17,18].

Описание кинетики эволюции плотности ПД указывает на общую тенденцию к ее снижению с увеличением толщины пористого слоя, однако не может прояснить деталей упругого поведения взаимодействующих между собой ПД вблизи пор. Общее представление об особенностях этого поведения и о микромеханизмах снижения плотности ПД можно получить, используя альтернативный подход, который заключается в компьютерном моделировании дискретной динамики дислокаций вблизи пор в напряженном растущем слое GaN. В разработке этого подхода можно взять за основу результаты, полученные при развитии двух важных направлений в теории дислокаций. Первое направление — это изучение упругого взаимодействия дислокаций с внутренними порами в твердом теле [19–38]. Второе направление — это анализ динамики формирования различных дислокационных структур в условиях внешних воздействий в рамках двумерной ньютоновской динамики [39–43]. В последние годы развитие этого направления связано с описанием пластической деформации вблизи

границ зерен [42,43], клиновых дисклинаций [44–54], трещин [55–59], пор [59–63] и включений [64–66].

Цель настоящей работы — изучение динамики ПД вблизи поры в напряженном слое GaN с помощью компьютерного моделирования на стыке двух упомянутых выше направлений.

2. Модель

Рассмотрим модельный случай одномерного решеточного несоответствия слоя и подложки. Пусть в центре области моделирования ($-x_b \leq x \leq x_b, -y_b \leq y \leq y_b$) расположена цилиндрическая пора (рис. 1), имеющая круглое сечение радиуса R с координатами центра, совпадающими с началом декартовой системы координат ($x = 0, y = 0$). Ось поры перпендикулярна поверхности слоя и совпадает с осью z . На большом удалении от этой поры, на линии ($x = -x_b, y$), в момент времени $t = 0$ под действием действующего в слое сдвигового напряжения τ , вызванного растягивающим напряжением несоответствия σ , начинается генерация положительных краевых дислокаций с векторами Бюргерса \mathbf{b} , направленными вдоль оси x . Одновременно начинается генерация отрицательных дислокаций с векторами Бюргерса $-\mathbf{b}$ на линии ($x = x_b, y$). Распределение дислокаций вдоль оси y и моменты их появления задаются с помощью генератора случайных чисел, а плоскости $y = \text{const}$ служат плоскостями скольжения дислокаций. Если в процессе моделирования расстояние между двумя дислокациями противоположных знаков становится меньше $3a$ (a — параметр решетки), то считается, что дислокации аннигилируют.

Каждая дислокация в данной модели находится под совместным действием сил, вызванных сдвиговым напряжением τ и силой изображения со стороны поры. При этом предполагается, что дислокация может перемещаться только в своей плоскости скольжения вдоль

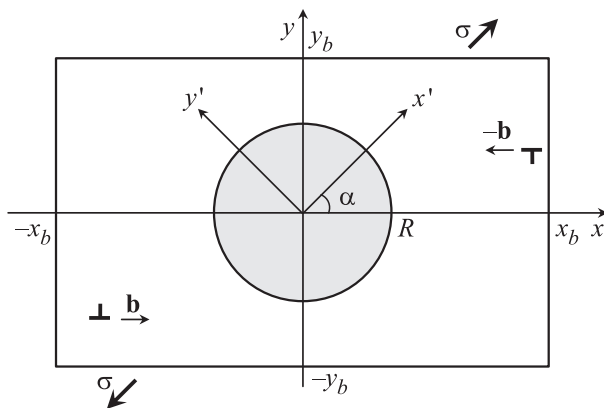


Рис. 1. Начальное состояние области моделирования при $t = 0$. Вдали от нее под углом 45° к оси x приложено однородное растягивающее напряжение σ , вызванное несоответствием кристаллических решеток слоя и подложки.

оси x , и в этом случае ее движение определяется только проекциями сил на ось x .

Уравнение движения i -й дислокации можно представить в виде [46,47]

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} + \beta \frac{dx_i}{dt} = F_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (1)$$

где m — эффективная масса дислокации, x_i — ее координата, β — коэффициент динамического трения, F_i — равнодействующая всех сторонних сил, действующих на дислокацию, N — общее число дислокаций, генерированных за время проведения одного численного эксперимента. Первая производная dx_i/dt в этом уравнении учитывает динамическое (вязкое) трение дислокации при ее скольжении в кристаллической решетке. Масса дислокации дана в стандартном приближении [67]: $m = \rho b^2/2$, где ρ — плотность материала, b — величина вектора Бюргерса дислокации.

Суммарную силу, действующую на i -ю дислокацию с координатами (x_i, y_i) , можно записать в следующем виде

$$F_i = F_{\sigma i} + F_{hi} + \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^N F_{ij}. \quad (2)$$

Первое слагаемое в правой части формулы (2) определяет силу, обусловленную приложенным растягивающим напряжением σ , второе — силу ее упругого взаимодействия с порой (силу изображения), третье — суммарную силу упругого взаимодействия i -й дислокации со всеми остальными дислокациями.

Чтобы определить первое слагаемое, воспользуемся готовым решением задачи о влиянии круглого отверстия на распределение напряжений в пластине [68]. Компоненты напряжений в полярной системе координат (r, θ) :

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} &= \frac{\sigma}{2} \left(1 - \frac{R^2}{r^2} \right) + \frac{\sigma}{2} \left(1 - \frac{4R^2}{r^2} + \frac{3R^4}{r^4} \right) \cos 2\theta, \\ \sigma_{\theta\theta} &= \frac{\sigma}{2} \left(1 + \frac{R^2}{r^2} \right) - \frac{\sigma}{2} \left(1 + \frac{3R^4}{r^4} \right) \cos 2\theta, \\ \sigma_{r\theta} &= -\frac{\sigma}{2} \left(1 + \frac{2R^2}{r^2} - \frac{3R^4}{r^4} \right) \sin 2\theta. \end{aligned} \quad (3)$$

Чтобы найти сдвиговое напряжение τ , действующее в плоскостях скольжения дислокаций, перейдем от полярной системы координат к декартовой системе (x', y') , повернутой относительно системы координат (x, y) на угол α (рис. 1). Для этого воспользуемся известными формулами [68]:

$$\begin{aligned} \sigma_{x'x'} &= \sigma_{rr} \cos^2 \theta + \sigma_{\theta\theta} \sin^2 \theta - 2\sigma_{r\theta} \sin \theta \cos \theta, \\ \sigma_{y'y'} &= \sigma_{rr} \sin^2 \theta + \sigma_{\theta\theta} \cos^2 \theta + 2\sigma_{r\theta} \sin \theta \cos \theta, \\ \sigma_{x'y'} &= (\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}) \sin \theta \cos \theta + \sigma_{r\theta} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta), \end{aligned} \quad (4)$$

где $r^2 = x'^2 + y'^2$, $\theta = \arctan(x'/y')$. Выражая τ через эти компоненты, находим

$$\tau = -\frac{\sigma_{x'x'} - \sigma_{y'y'}}{2} \sin 2\alpha + \sigma_{x'y'} \cos 2\alpha. \quad (5)$$

Подставляя формулы (3) и (4) в равенство (5), получим для $\alpha = \pi/4$

$$\tau = -\frac{\sigma}{2} \left\{ \left(1 - \frac{3R^2}{r^2} + \frac{3R^4}{r^4} \right) \cos^2 \theta + \left(1 - \frac{R^2}{r^2} - \frac{3R^4}{r^4} \right) \sin^2 \theta \right\}. \quad (6)$$

Тогда первое слагаемое в правой части равенства (2) равно $F_{\sigma i} = b\tau(x_i, y_i)$, где $\tau(x_i, y_i)$ определяется формулой (6) с учетом того, что $x_i = r_i \cos \theta_i$, $y_i = r_i \sin \theta_i$ и $r_i^2 = x_i^2 + y_i^2$, откуда имеем

$$F_{\sigma i} = -\frac{b\sigma}{2r_i^6} \left\{ x_i^2 [3R^2(R^2 - r_i^2) + r_i^4] - y_i^2 [R^2(3R^2 + r_i^2) - r_i^4] \right\}. \quad (7)$$

Чтобы найти силу изображения, сначала рассмотрим более общий случай и найдем поля напряжений краевой дислокации в произвольной точке K с учетом длинной цилиндрической поры (рис. 2, а). Решение этой задачи было получено в работе [19] в виде функции напряжений Эри ψ , которую можно представить в виде суммы

$$\psi = \psi_1 + \psi_2, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \psi_1 = & \frac{Gb_{x_0}}{4\pi(1-\nu)} \\ & \times \left\{ -2r_1 \ln r_1 \sin \theta_1 + 2(r_2 \ln r_2 \sin \theta_2 - r \ln r \sin \theta) - \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi^3} \left[\sin 2\theta_2 - \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi} \frac{\sin \theta_2}{r_2} \right] - \frac{R^2 \sin \theta}{r} \right\}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \psi_2 = & \frac{Gb_{y_0}}{4\pi(1-\nu)} \left\{ 2r_1 \ln r_1 \sin \theta_1 - 2(r_2 \ln r_2 \sin \theta_2 - r \ln r \sin \theta) + \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi^3} \left[2\xi^2 \ln r_2 - \cos 2\theta_2 + \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi} \frac{\cos \theta_2}{r_2} \right] - 2(\xi^2 - 1) \frac{R}{\xi} \ln r + \frac{R^2 \cos \theta}{r} \right\}, \end{aligned} \quad (10)$$

где G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, b_{x_0} и b_{y_0} — величины компонент вектора Бюргера дислокации в декартовой системе координат (x_0, y_0, z_0) , в которой начало координат лежит в центре поры, ось z_0 совпадает с осью поры, а ось x_0 проходит через линию

дислокации, ориентированную вдоль оси z_0 и пересекающую плоскость (x_0, y_0) в точке $(x_0 = c, y_0 = 0)$ (рис. 2, а); $r^2 = x_0^2 + y_0^2$, $r_{1,2}^2 = x_{01,2}^2 + y_0^2$, $x_{01} = x_0 - c$, $x_{02} = x_0 - R^2/c$, $\xi = c/R \geq 1$. Углы θ, θ_1 и θ_2 обозначены на рис. 2, а.

Из определенной таким образом функции Эри найдем поля напряжений $\sigma_{x_0x_0}, \sigma_{y_0y_0}, \sigma_{x_0y_0}$ по известным формулам [68]

$$\sigma_{x_0x_0} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_0^2}, \quad \sigma_{y_0y_0} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_0^2}, \quad \sigma_{x_0y_0} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_0 \partial y_0}. \quad (11)$$

Выполнив дифференцирование, получаем:

$$\begin{aligned} \sigma_{x_0x_0} = & \frac{Gb_{x_0}}{4\pi(1-\nu)} \left\{ -2 \left(\frac{y_0}{r_1^2} + \frac{2x_{01}^2 y_0}{r_1^4} \right) + 2 \left(\frac{y_0}{r_2^2} + \frac{2x_{02}^2 y_0}{r_2^4} - \frac{y_0}{r^2} + \frac{2x_0^2 y_0}{r^4} \right) - \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi^3} \left[\frac{4x_{02} y_0}{r_2^4} - \frac{16x_{02}^3 y_0}{r_2^6} - \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi} \left(\frac{2y_0}{r_2^4} - \frac{8x_{02}^2 y_0}{r_2^6} \right) \right] - R^2 \left(\frac{2y_0}{r^4} - \frac{8x_0^2 y_0}{r^6} \right) \right\} \\ & + \frac{Gb_{y_0}}{4\pi(1-\nu)} \left\{ 2 \left(-\frac{x_{01}}{r_1^2} + \frac{2x_{01}^3}{r_1^4} \right) - 2 \left(-\frac{x_{02}}{r_2^2} + \frac{2x_{02}^3}{r_2^4} + \frac{x_0}{r^2} + \frac{2x_0^3}{r^4} \right) + \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi^3} \left[2\xi^2 \left(\frac{1}{r_2^2} + \frac{2x_{02}^2}{r_2^4} \right) - \frac{12x_{02}^3}{r_2^6} + \frac{16x_{02}^4}{r_2^6} + \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi} \left(\frac{6x_{02}}{r_2^4} - \frac{8x_{02}^3}{r_2^6} \right) \right] - 2(\xi^2 - 1) \times \right. \\ & \left. \frac{R}{\xi} \left(\frac{1}{r^2} + \frac{2x_0^2}{r^4} \right) + R^2 \left(\frac{6x_0}{r^4} - \frac{8x_0^3}{r^6} \right) \right\}, \quad (12) \\ \sigma_{y_0y_0} = & \frac{Gb_{x_0}}{4\pi(1-\nu)} \left\{ -2 \left(\frac{y_0}{r_1^2} - \frac{2x_{01}^2 y_0}{r_1^4} \right) + 2 \left(\frac{y_0}{r_2^2} - \frac{2x_{02}^2 y_0}{r_2^4} - \left(\frac{y_0}{r^2} - \frac{2x_0^2 y_0}{r^4} \right) - \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi^3} \left[-\frac{12x_{02} y_0}{r_2^4} + \frac{16x_{02}^3 y_0}{r_2^6} + \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi} \left(\frac{2y_0}{r_2^4} - \frac{8x_{02}^2 y_0}{r_2^6} \right) \right] + R^2 \left(\frac{2y_0}{r^4} + \frac{8x_0^2 y_0}{r^6} \right) \right\} \\ & + \frac{Gb_{y_0}}{4\pi(1-\nu)} \left\{ 2 \left(-\frac{3x_{01}}{r_1^2} - \frac{2x_{01}^3}{r_1^4} \right) - 2 \left(\frac{3x_{02}}{r_2^2} - \frac{2x_{02}^3}{r_2^4} - \frac{3x_0}{r^2} - \frac{2x_0^3}{r^4} \right) - \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi^3} \left[2\xi^2 \left(\frac{1}{r_2^2} - \frac{2x_{02}^2}{r_2^4} \right) - \frac{4}{r_2^2} + \frac{20x_{02}^2}{r_2^4} - \frac{16x_{02}^4}{r_2^6} + \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi} \left(-\frac{6x_{02}}{r_2^4} + \frac{8x_{02}^3}{r_2^6} \right) \right] - 2(\xi^2 - 1) \frac{R}{\xi} \left(\frac{1}{r^2} - \frac{2x_0^2}{r^4} \right) + R^2 \left(-\frac{6x_0}{r^4} + \frac{8x_0^3}{r^6} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{x_0y_0} = & \frac{Gb_{x_0}}{4\pi(1-\nu)} \left\{ -2 \left(\frac{x_{01}}{r_1^2} - \frac{2x_{01}^3}{r_1^4} \right) + 2 \left(\frac{x_{02}}{r_2^2} - \frac{2x_{02}^3}{r_2^4} \right) \right. \\ & - \frac{x_0}{r^2} - \frac{2x_0^3}{r^4} \left. - \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi^3} \left[\frac{2}{r_2^2} - \frac{16x_{02}^2}{r_2^4} + \frac{16x_{02}^4}{r_2^6} \right] \right. \\ & + \left. \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi} \left(\frac{6x_{02}}{r_2^4} - \frac{8x_{02}^3}{r_2^6} \right) \right] + R^2 \left(\frac{6x_0}{r^4} - \frac{8x_0^3}{r^6} \right) \left. \right\} \\ & + \frac{Gb_{y_0}}{4\pi(1-\nu)} \left\{ 2 \left(-\frac{y_0}{r_1^2} + \frac{2x_{01}^2y_0}{r_1^4} \right) + 2 \left(\frac{y_0}{r_2^2} - \frac{2x_{02}^2y_0}{r_2^4} \right) \right. \\ & - \frac{y_0}{r^2} + \frac{2x_0^2y_0}{r^4} \left. + \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi^3} \left[2\xi^2 \frac{2x_{02}y_0}{r_2^4} - \frac{8x_{02}y_0}{r_2^4} \right] \right. \\ & + \left. \frac{16x_{02}^3y_0}{r_2^6} + \frac{(\xi^2 - 1)R}{\xi} \left(\frac{2y_0}{r_2^4} - \frac{8x_{02}^2y_0}{r_2^6} \right) \right] \\ & - \left. 2(\xi^2 - 1) \frac{R}{\xi} \frac{2x_0y_0}{r^4} + R^2 \left(\frac{2y_0}{r^4} - \frac{8x_0^2y_0}{r^6} \right) \right\}. \quad (14) \end{aligned}$$

Теперь, когда известны напряжения в произвольной точке K в системе координат (x_0, y_0, z_0) , связанной с положением дислокации относительно центра поры, остается найти сдвиговое напряжение в плоскости скольжения этой дислокации в исходной системе координат (x, y, z) . Для этого воспользуемся известной формулой преобразования компонент тензора напряжений при повороте системы координат на угол φ [68]

$$\sigma_{xy} = -\frac{\sigma_{x_0x_0} - \sigma_{y_0y_0}}{2} \sin 2\varphi + \sigma_{x_0y_0} \cos 2\varphi \quad (15)$$

с учетом преобразования координат $x_0 = x \cos \varphi + y \sin \varphi$, $y_0 = -x \sin \varphi + y \cos \varphi$, $z_0 = z$ и компонент вектора Бюргерса $b_{x_0} = b_x \cos \varphi$, $b_{y_0} = -b_x \sin \varphi$ при $b_x = b$.

Получая таким образом напряжение σ_{xy} и вычитая из него напряжение σ_{xy}^∞ краевой дислокации в упруго-однородной бесконечной среде в отсутствие поры [69], находим напряжение изображения $\sigma_{xy}^{(h)}$, действующее на дислокацию со стороны поры

$$\sigma_{xy}^{(h)} = \sigma_{xy} - \sigma_{xy}^\infty. \quad (16)$$

Тогда сила изображения, действующая на i -ю дислокацию, определяется как

$$F_{hi} = b\sigma_{xy}^{(h)}(x_i, y_i). \quad (17)$$

Рассмотрим теперь суммарную силу, действующую на дислокацию со стороны других дислокаций в присутствии поры. Если в рассматриваемой области находится N дислокаций, то силу F_{ij} , действующую на i -ю дислокацию со стороны j -й дислокации, с учетом экранировки упругого поля последней свободной поверхностью поры

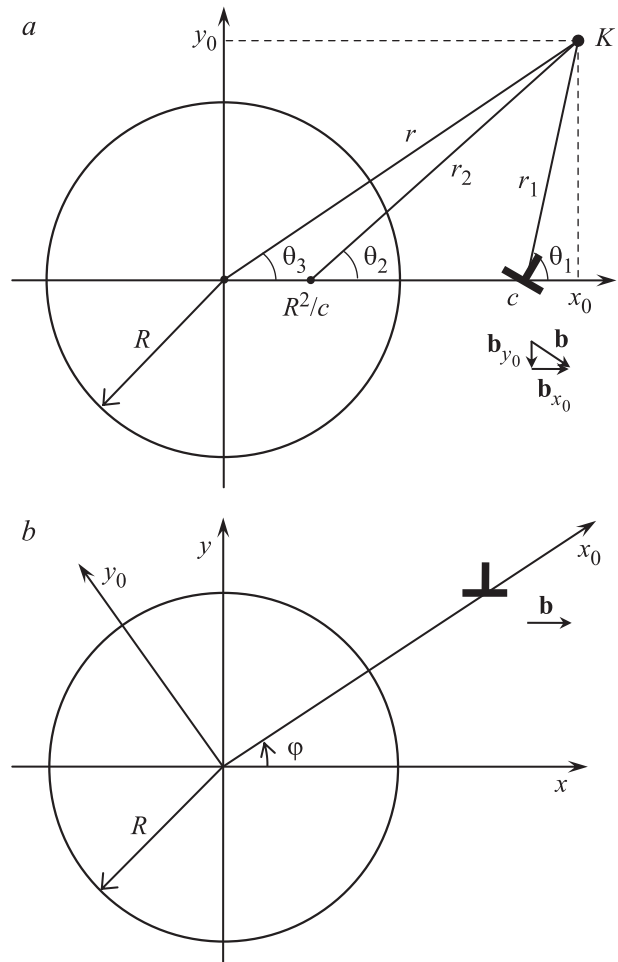


Рис. 2. Положение и ориентация краевой дислокации вблизи поры в повернутой (а) и исходной (б) системах координат, используемых при расчете силы изображения, действующей на дислокацию со стороны поры.

можно записать как

$$F_{ij} = b\sigma_{xy}(x_i - x_j, y_i - y_j), \quad (18)$$

где $\sigma_{xy}(x_i - x_j, y_i - y_j)$ — сдвиговое напряжение, создаваемое j -й дислокацией, расположенной в точке (x_j, y_j) , и действующее в точке залегания i -й дислокации (x_i, y_i) . Оно получается из формул (12)–(15) заменой x на $x_i - x_j$ и y на $y_i - y_j$.

Таким образом, все слагаемые суммарной силы (2), действующей на произвольную дислокацию вблизи поры, определены.

3. Результаты

Компьютерное моделирование динамики дискретного дислокационного ансамбля вблизи поры проводилось путем численного интегрирования N уравнений движения вида (1), в правой части которых стоит сила (2). При этом использовался компьютерный код,

Характеристики дислокационной структуры в зависимости от размера поры

Радиус поры, nm	Отношение площади поры к площади области моделирования	Количество аннигилировавших дислокаций	Количество дислокаций, поглощенных порой	Количество дислокаций, вышедших за пределы области моделирования	Конечная плотность дислокаций в области моделирования, см^{-2}
1	$1.6 \cdot 10^{-4}$	48	1	167	$1.7 \cdot 10^{11}$
10	0.016	22	29	173	$1.3 \cdot 10^{11}$
30	0.141	6	107	129	$4 \cdot 10^{10}$

разработанный в стандартной среде программирования Wolfram Mathematica. Он позволяет получать временные зависимости координаты и скорости каждой дислокации и снабжен специальным интерфейсом визуализации структуры дислокационного ансамбля в виде карты расположения дислокаций в любой момент времени.

Исследование динамики дислокационного ансамбля проводилось внутри двумерной прямоугольной области упруго-изотропной среды с размерами $L \times 2L$, где $L = 100 \text{ nm}$, в центр которой помещалась пора со свободной поверхностью. Значения упругих модулей системы выбирались для кристалла GaN в приближении его упругой изотропии согласно данным, полученным в [70]: $G = 121 \text{ GPa}$, $\nu = 0.26$. Для остальных параметров были выбраны следующие значения: величина вектора Бюргера $b \approx 2.78 \text{ \AA}$, плотность $\rho = 6150 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, масса дислокации $m = 3.1 \cdot 10^{-16} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1}$, $\beta \approx 7.22 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$. Коэффициент динамического трения определялся по известной [67] формуле $\beta = k_B T B / (v_s \Omega)$, где k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, v_s — скорость звука, Ω — атомный объем. Все расчеты проводились для $N = 250$ дислокаций, вероятность появления которых на экране в определенный момент времени и с определенной координатой по оси y соответствовала равномерному распределению. Каждая дислокация начинала свое движение с линий $x = \pm x_{in} = \pm 120 \text{ nm}$ за пределами области моделирования. Моделирование проводилось в течение времени $t = 10 \text{ ns}$ при значении растягивающего внешнего напряжения $\sigma = 10 \text{ GPa}$.

Примеры результатов проведенных расчетов представлены на рис. 3 в виде карт конечного распределения ПД вблизи поры. Здесь рассмотрены три случая формирования дислокационной структуры при разных значениях радиуса поры: $R = 1 \text{ nm}$ (рис. 3, *a*), 10 nm (рис. 3, *b*) и 30 nm (рис. 3, *c*).

В первом случае (рис. 3, *a*) пора практически не влияет на формирование дислокационной структуры. Большая часть (167 ПД) за 10 ns пересекла область моделирования и вышла за ее пределы, меньшая часть (48 ПД) за это время аннигилировала, одна попала в пору и была ею захвачена, а остальные (17 положительных и 17 отрицательных ПД) сформировали устойчивые равновесные дипольные, квадрупольные и мультипольные конфигурации.

Во втором случае (рис. 3, *b*) наличие поры привело к заметным количественным изменениям в структуре ансамбля ПД. Хотя их большая часть (173 ПД) по-прежнему пересекла область моделирования и вышла за ее пределы, и достаточно большое количество (22 ПД) аннигилировало, однако вторая по численности часть ансамбля (29 ПД) оказалась поглощена порой, и только оставшиеся 13 положительных и 13 отрицательных ПД остались в области моделирования вне поры.

В третьем случае (рис. 3, *c*) пора относительно большого размера поглотила почти половину (107) ПД.

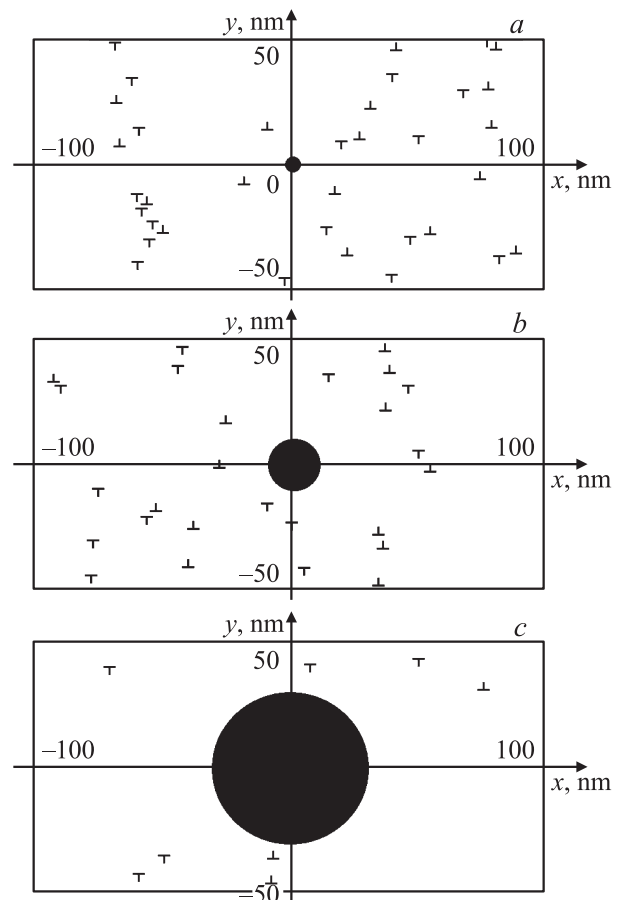


Рис. 3. Карты распределения проникающих дислокаций вблизи цилиндрической поры радиусом 1 (*a*), 10 (*b*) и 30 nm (*c*) в области моделирования с размерами $200 \times 100 \text{ nm}$, к которой приложено однородное одноосное растягивающее напряжение 10 GPa под углом 45° к оси x .

Часть (129) ПД прошла мимо поры и вышла за пределы области моделирования, 6 ПД аннигилировали, и всего 8 ПД остались в области моделирования вне поры.

Количественные показатели развития дислокационной структуры вблизи пор за отведенное время 10 ns под действием растягивающего напряжения 10 GPa сведены в таблице.

4. Заключение

Проведенное компьютерное моделирование дискретной динамики ПД показало, что создание пор является эффективным способом контроля плотности ПД, генерируемых в процессе релаксации напряжений несоответствия в эпитаксиальных слоях GaN. Полученные результаты говорят о том, что увеличение доли поверхности пор на поверхности слоя до 2% должно приводить к снижению конечной плотности ПД примерно в 1.5 раза, а увеличение этой доли до 15% — примерно в 4.5 раза.

Список литературы

- [1] T. Paskova, D.A. Hanser, K.R. Evans. Proc. IEEE **98**, 1324 (2010).
- [2] S. Nakamura, M.R. Krames. Proc. IEEE **101**, 2211 (2013).
- [3] J. Millán, P. Godignon, X. Perpiñá, A. Pérez-Tomás, J. Rebollo. IEEE Trans. Power Electronics **29**, 2155 (2014).
- [4] Z. Alaie, S.M. Nejad, M.N. Yousefi. Mater. Sci. Semicond. Proc. **29**, 16 (2015).
- [5] S. Fujita. Jpn. J. Appl. Phys. **54**, 030101 (2015).
- [6] L.Y. Kuritzki, J.S. Speck. MRS Comm. **5**, 463 (2015).
- [7] T. Matsuoka. Int. J. Optomechatronics **9**, 1 (2015).
- [8] J. Wang, P. Mulligan, L. Brillson, L.R. Cao. Appl. Phys. Rev. **2**, 031102 (2015).
- [9] F.A. Marino, N. Faralli, T. Palacios, D.K. Ferry, S.M. Goodnick, M. Saraniti. IEEE Trans. Electron Devices **57**, 353 (2010).
- [10] S.E. Bennett. Mater. Sci. Technol. **26**, 9 (2010).
- [11] Y.D. Wang, K.Y. Zang, S.J. Chua, S. Tripathy, C.G. Fonstad, P. Chen. Appl. Phys. Lett. **87**, 251915 (2005).
- [12] H. Hartono, C.B. Soh, S.Y. Chow, S.J. Chua, E.A. Fitzgerald. Appl. Phys. Lett. **90** 17191 (2007).
- [13] D.H. Lee, J.J. Jang, B.H. Kong, H.K. Cho, O. Nam. Jpn. J. Appl. Phys. Part1. **49**, 058001 (2010).
- [14] M.G. Mynbaeva, A.E. Nikolaev, A.A. Sitnikova, K.D. Mynbaev. Cryst. Eng. Commun. **15**, 3640 (2013).
- [15] A.E. Romanov, W. Pompe, G.E. Beltz, J.S. Speck. Appl. Phys. Lett. **69**, 3342 (1996).
- [16] V.E. Bougrov, M.A. Odnoblyudov, A.E. Romanov, T. Lang, O.V. Konstantinov. Phys. Status Solidi A **203**, R25 (2006).
- [17] D.M. Artemiev, T.S. Orlova, V.E. Bougrov, M.A. Odnoblyudov, A.E. Romanov. AIP Conf. Proc. **1583**, 310 (2014).
- [18] D.M. Artemiev, T.S. Orlova, V.E. Bougrov, M.A. Odnoblyudov, A.E. Romanov. J. Electron. Mater. **44**, 1287 (2015).
- [19] J. Dundurs, T. Mura. J. Mech. Phys. Solids **12**, 177 (1964).
- [20] E. Smith. Int. J. Eng. Sci. **6**, 129 (1968).
- [21] J. Dundurs. In: Mathematical Theory of Dislocations / Ed. T. Mura. ASME, N.Y. (1969). P. 70.
- [22] G.P. Sendekyj. Phys. Status Solidi A **3**, 529 (1970).
- [23] W.G. Wolfer, W.J. Drugan. Phil. Mag. A **57**, 923 (1988).
- [24] V.A. Lubarda. J. Elasticity **52**, 289 (1999).
- [25] M.Yu. Gutkin, A.G. Sheinerman. Phys. Status Solidi B **231**, 356 (2002).
- [26] V.A. Lubarda, X. Markenscoff. Mater. Sci. Eng. A **349**, 327 (2003).
- [27] V.A. Lubarda, M.S. Schneider, D.H. Kalantar, B.R. Remington, M.A. Meyers. Acta Mater. **52**, 1397 (2004).
- [28] Q.H. Fang, Y.W. Liu. Phys. Status Solidi B **243**, R28 (2006).
- [29] Q.H. Fang, B. Li, Y.W. Liu. Phys. Status Solidi B **244**, 2576 (2007).
- [30] М.Ю. Гуткин, А.Г. Шейнерман. ФТТ **49**, 1595 (2007).
- [31] M.Yu. Gutkin, A.G. Sheinerman, M.A. Smirnov. Mech. Mater. **41**, 905 (2009).
- [32] M.Yu. Gutkin, A.G. Sheinerman, M.A. Smirnov, V.G. Kohn, T.S. Argunova, J.H. Je, J.W. Jung. Appl. Phys. Lett. **93**, 151905 (2008).
- [33] V.A. Lubarda. Int. J. Plasticity **27**, 181 (2011).
- [34] V.A. Lubarda. Int. J. Solids Structures **48**, 648 (2011).
- [35] S.S. Moeini-Ardakani, M.Yu. Gutkin, H.M. Shodja. Scripta Mater. **64**, 709 (2011).
- [36] H.M. Shodja, M.Yu. Gutkin, S.S. Moeini-Ardakani. Phys. Status Solidi B **248**, 1437 (2011).
- [37] A.L. Kolesnikova, M.Yu. Gutkin, S.A. Krasnitskii, A.E. Romanov. Int. J. Solids Structures **50**, 1839 (2013).
- [38] L. Wang, J. Zhou, D. Hui, S. Zhang. Int. J. Mech. Sci. **79**, 168 (2014).
- [39] R.J. Amodeo, N.M. Ghoniem. Phys. Rev. B **41**, 6958 (1990).
- [40] R.J. Amodeo, N.M. Ghoniem. Phys. Rev. B **41**, 6968 (1990).
- [41] E. van der Giessen, A. Needleman. Mod. Simul. Mater. Sci. Eng. **3**, 689 (1995).
- [42] S.S. Quek, Z. Wu, Y.W. Zhang, D.J. Srolovitz. Acta Mater. **75**, 92 (2014).
- [43] S.S. Quek, Z.H. Chooi, Z. Wu, Y.W. Zhang, D.J. Srolovitz. J. Mech. Phys. Solids **88**, 252 (2016).
- [44] M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, A.E. Romanov, P. Klimanek. Phys. Status Solidi A **193**, 35 (2002).
- [45] К.Н. Микаелян, М. Сеefeldt, М.Ю. Гуткин, П. Климанек, А.Е. Романов. ФТТ **45**, 2002 (2003).
- [46] S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko. Acta Mater. **52**, 3793 (2004).
- [47] С.В. Бобылев, М.Ю. Гуткин, И.А. Овидько, ФТТ **46**, 2053 (2004).
- [48] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. Письма в ЖТФ **33**, 9, 87 (2007).
- [49] Г.Ф. Сарафанов, В.Н. Перевезенцев. Вопросы материаловедения **49**, 1, 5 (2007).
- [50] Г.Ф. Сарафанов. ФТТ **50**, 1793 (2008).
- [51] O. Dmitrieva, J.V. Svirina, E. Demir, D. Raabe. Mod. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 085011 (2010).
- [52] Yu.V. Svirina, V.N. Perevezentsev. Tech. Phys. **58**, 1224 (2013).
- [53] М.Ю. Гуткин, Е.А. Ржавцев. ФТТ **57**, 2374 (2015).
- [54] E.A. Rzhavtsev, M.Yu. Gutkin. Scripta Mater. **100**, 102 (2015).
- [55] H.H.M. Cleveringa, E. Van der Giessen, A. Needleman. J. Mech. Phys. Solids **48**, 1133 (2000).
- [56] M.P. O'Day, W.A. Curtin. J. Mech. Phys. Solids **53**, 359 (2005).
- [57] T.K. Bhandakkar, A.C. Chng, W.A. Curtin, H. Gao. J. Mech. Phys. Solids **58**, 530 (2010).
- [58] M. Huang, J. Tong, Z. Li. Int. J. Plasticity **54**, 229 (2014).

- [59] S. Liang, M. Huang, Z. Li. *Int. J. Solids Structures* **56–57**, 209 (2015).
- [60] M. Huang, Z. Li, C. Wang. *Acta Mater.* **55**, 1387 (2007).
- [61] M.I. Hussein, U. Borg, C.F. Niordson, V.S. Deshpande. *J. Mech. Phys. Solids* **56**, 114 (2008).
- [62] J. Segurado, J. Llorca. *Acta Mater.* **57**, 1427 (2009).
- [63] J. Segurado, J. Llorca. *Int. J. Plasticity* **26**, 806 (2010).
- [64] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **39**, 99 (2014).
- [65] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. *J. Mater. Sci.* **50**, 4430 (2015).
- [66] Я.В. Конаков, И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман. *ФТТ* **58**, 1757 (2016).
- [67] U.F. Kocks, A.S. Argon, M.F. Ashby. *Prog. Mater. Sci.* **19**, 73 (1975).
- [68] С.П. Тимошенко, Дж. Гудьер. *Теория упругости*. Наука, М. (1975). 576 с.
- [69] Дж. Хирт, Й. Лоте. *Теория дислокаций*. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [70] В.И. Николаев, В.В. Шпейзман, Б.И. Смирнов. *ФТТ* **42**, 428 (2000).