05

О зарождении дислокационной петли несоответствия в квантовой точке

© *А.Л. Колесникова, А.Е. Романов*

Институт проблем машиноведения РАН, С.-Петербург
T-mail: ankolesnikova@yandex.ru
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург
E-mail:aer@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 31 июля 2003 г.

Рассмотрен энергетический критерий зарождения круговой призматической дислокационной петли несоответствия в сфероидальном включении, моделирующем квантовую точку. Получена зависимость критического радиуса включения, в котором возможно зарождение петли, от величины несоответствия между кристаллическими решетками включения и матрицы.

Зарождение дислокации несоответствия (ДН) служит доминирующим механизмом релаксации упругих напряжений, возникающих в тонких гетероэпитаксиальных пленках из-за рассогласования кристаллических решеток пленки и подложки [1]. Хорошо известно, что зарождение ДН происходит при превышении толщины пленки h некоторого критического значения h_c, зависящего от деформации несоответствия ε_m. Подобное явление должно иметь место и в случае упруго напряженных квантовых точек. Целью данной работы является выявление условий зарождения ДН в малом напряженном включении, моделирующем квантовую точку. Отметим, что данная простая задача до сего времени не была поставлена и решена. Для когерентных островков на подложках, т. е. на стадии зарождения квантовых точек, был предложен ряд моделей зарождения дислокации несоответствия [2,3]. Однако они основывались на решении двухмерных задач и поэтому были приближенными.

Упругие деформации и напряжения в квантовых точках вызывают существенные изменения их свойств. Так, однородные упругие деформации изменяют ширину запрещенной зоны [4], а неоднородные упругие поля ДН могут оказывать влияние на оптические свойства материала с квантовыми точками [5].

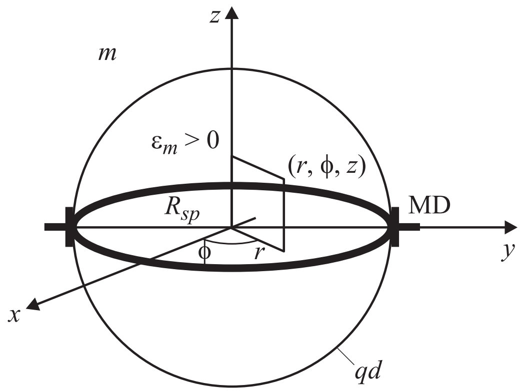

Рис. 1. Квантовая точка с дислокацией несоответствия. qd — квантовая точка, MD — дислокация несоответствия, m — матрица, ε_m — параметр несоответствия.

В качестве модели квантовой точки выберем сфероид радиуса R_{sp} с заданной пластической изотропной дилатацией, внедренный в материал матрицы (рис. 1). Математически дилатация может быть описана с помощью следующего тензора пластической дисторсии [6]:

$$\beta^*_{xx} = \beta^*_{yy} = \beta^*_{zz} = \varepsilon_m \delta(\Omega_{sp}), \tag{1}$$

где $\varepsilon_m = \frac{a_{sp} - a_m}{a_m}$ — параметр несоответствия между включением и средой, a_{sp} — параметр кристаллической решетки сфероида, a_m — параметр кристаллической решетки матрицы, $\delta(\Omega_{sp})$ — дельта-функция Дирака для области Ω_{sp}, занимаемой сфероидом, определяется следующим образом:

$$\delta(\Omega_{sp}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in \Omega_{sp} \\ 0, & \mathbf{r} \notin \Omega_{sp} \end{cases}.$$

Знак параметра ε_m соответствует характеру дилатации: $\varepsilon_m > 0$ соответствует расширению, $\varepsilon_m < 0$ — сжатию.

Упругие напряжения и энергия включения с дисторсией (1) хорошо известны и для изотропного упругого тела могут быть выражены через элементарные функции [6,7]. Напряжения внутри включения постоянны и равны:

$$\sigma_{rr}^{(in)} = \sigma_{\varphi\varphi}^{(in)} = \sigma_{zz}^{(in)} = -\frac{4G\varepsilon_m(1+\nu)}{3(1-\nu)}, \tag{2}$$

где (r, φ, z) — цилиндрическая система координат (рис. 1), G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона.
Энергия включения есть

$$E_{sp} = \frac{8\pi(1+\nu)}{3(1-\nu)} G\varepsilon_m^2 R_{sp}^3. \tag{3}$$

При выводе (2) и (3) мы пренебрегли различием упругих свойств материалов включения и матрицы.

Уместно предположить, что для уменьшения упругой энергии включения (3) в нем зарождается призматическая дислокационная петля несоответствия (на рис. 1 обозначена как MD — misfit dislocation). Она расположена на поверхности частицы. Энергия включения с петлей ДН должна оказаться меньше исходной энергии включения, что задает следующий энергетический критерий зарождения петли:

$$E_{sp} \geqslant E_{sp} + E_{loop} + W, \tag{4}$$

где E_{loop} — энергия дислокационной петли, W — энергия взаимодействия петли и сфероида.

Собственная упругая энергия призматической петли, имеющей величину вектора Бюргерса b, радиус a в приближении $a \gg b$ описывается формулой [8]:

$$E_{loop} \approx \frac{Gb^2a}{2(1-\nu)} \left(\ln\frac{8\alpha a}{b} - 2\right), \tag{5}$$

где параметр α учитывает вклад энергии ядра дислокации; для неметаллов принимают $\alpha \approx 4$ [9].

В общем виде энергия взаимодействия двух дефектов определяется из соотношений [6]:

$$W = -\int\limits_{\Omega_I} \beta_{ij}^{*I}\sigma_{ij}^{II} dV = -\int\limits_{\Omega_{II}} \beta_{ij}^{*II}\sigma_{ij}^{I} dV, \tag{6}$$

где Ω_I, Ω_{II} — области, занимаемые дефектами I и II соответственно, β_{ij}^{*I}, β_{ij}^{*II} — пластические дисторсии дефектов, σ_{ij}^{I}, σ_{ij}^{II} — упругие напряжения, создаваемые дефектами.

Пластическая дисторсия призматической петли, расположенной в плоскости $X0Y$ (рис. 1), есть [6]:

$$\beta_{zz}^{*loop} = \pm bH\left(1 - \frac{r}{a}\right)\delta(z), \tag{7}$$

где верхний знак соответствует петле внедрения, а нижний — петле вычитания, $\delta(z)$ — одномерная функция Дирака. На рис. 1 изображена ДН петля вычитания.

На основании выражений (2), (4)–(7) получаем следующий энергетический критерий зарождения дислокационной петли несоответствия на границе сферического включения и среды:

$$\frac{Gb^2R_{sp}}{2(1-\nu)}\left(\ln\frac{32R_{sp}}{b} - 2\right) - \frac{4\pi Gb\varepsilon_m(1+\nu)R_{sp}^2}{3(1-\nu)} \leqslant 0, \tag{8}$$

где учтено, что для включения с расширением ($\varepsilon_m > 0$) ДН есть петля вычитания, имеющая радиус $a = R_{sp}$, при котором выигрыш в общей энергии системы „включение–ДН петля“ максимален.

Запишем выражение для критического радиуса включения R_c, при котором зарождается ДН петля, в следующем виде:

$$R_c = \frac{3b}{8\pi(1+\nu)\varepsilon_m}\left(\ln\frac{1.08\alpha R_c}{b}\right). \tag{9}$$

Для сравнения приведем выражение для критической толщины пленки h_c, при которой зарождается краевая ДН [1], лежащая на гетерогранице и имеющая вектор Бюргерса, параллельный границе [1]:

$$h_c = \frac{b}{8\pi(1+\nu)\varepsilon_m}\left(\ln\frac{\alpha h_c}{b}\right). \tag{10}$$

На рис. 2 показана найденная из (9) зависимость критического радиуса включения R_c, при котором возможно зарождение петли несоответствия, от величины параметра несоответствия ε_m. Зависимость $h_c(\varepsilon_m)$ (10) для простейшей геометрии расположения ДН в пленке также представлена на рис. 2. Видно, что при одном и том же параметре несоответствия ε_m критический радиус включения R_c больше критической толщины пленки h_c в 3.5–4 раза.

Отметим, что механизмы образования дислокационных петель несоответствия могут быть как диффузионными, так и деформационными.

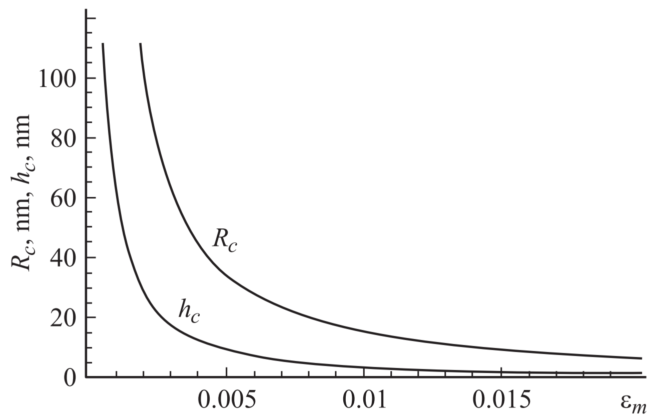

Рис. 2. Зависимости критического радиуса включения R_c и критической толщины пленки h_c от величины параметра несоответствия ε_m. Графики построены для $\nu = 0.3$, $\alpha = 4$, $b = 0.3$ nm.

Альтернативный механизм снижения энергии дилатационного включения может быть также связан с зарождением дислокационной петли в матрице снаружи включения [10].

Таким образом, получено выражение для критического радиуса включения, при котором зарождение ДН петли энергетически выгодно, в зависимости от параметра несоответствия кристаллических решеток включения и матрицы.

Список литературы

[1] *Beanland R., Dunstan D.J., Goodhew P.J.* // Advances in Physics. 1996. V. 45. N 2. P. 87–146.

[2] *Pehlke E., Moll N., Kley A., Scheffler M.* // Appl. Phys. A. 1997. V. 65. P. 525–534.

[3] *Tillmann K., Forster A.* // Thin Solid Films. 2000. V. 368. P. 93–104.

[4] *Константинов О.В., Котельников Е.Ю., Матвеенцев А.В., Романов А.Е.* // Письма в ЖТФ. 2001. Т. 27. В. 18. С. 40–46.

[5] *Chen X., Lou Y., Samia A.C., Burda C.* // Nano Letters. 2003. V. 3. N 6. P. 799–803.

[6] *Mura T.* Micromechanics of defects in solids. Boston: Martinus Nijhoff Publishers, 1987. P. 587.
[7] *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985. С. 352.
[8] *Dundurs J., Salamon N.J.* // J. Phys. C. 1972. V. 50. P. 125–133.
[9] *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М: Атомиздат, 1972. С. 600. *Chen X., Lou Y., Samia A.C., Burda C.* // Nano Letters. 2003. V. 3. N 6. P. 799–803.
[10] *Берт Н.А., Колесникова А.Л., Романов А.Е., Чалдышев В.В.* // ФТТ. 2002. Т. 44. № 12. С. 2139–2148.