Зарождение дислокационных петель в напряженных квантовых точках, внедренных в гетерослой

© А.Л. Колесникова, А.Е. Романов*

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 5 февраля 2004 г.)

Исследуется вопрос о зарождении призматических дислокационных петель в напряженных квантовых точках. Рассматриваются квантовые точки, находящиеся в гетероструктуре пленка–подложка с наведенными механическими напряжениями. Последние вызваны различием параметров кристаллических решеток пленки (гетерослоя) и подложки. Собственная пластическая деформация квантовой точки ε_m обусловлена несоответствием параметров решеток материалов квантовой точки и окружающей матрицы. Граница между гетерослоем и подложкой характеризуется собственным параметром несоответствия f. Анализируется влияние параметра несоответствия f на функциональную зависимость критического радиуса квантовой точки $R_c(\varepsilon_m)$, при котором в ней энергетически выгодно появление дислокационной петли.

Работа выполнена в рамках программы „Физика твердотельных наноструктур“ Минпрома РФ.

В настоящее время исследование структур, содержащих квантовые точки и квантовые нити, вызывает значительный интерес. Упругие деформации таких полупроводниковых гетероструктур существенно влияют на их электронные и оптоэлектронные свойства [1–3]. Квантовые точки и квантовые нити обычно имеют параметры кристаллической решетки, отличные от аналогичных параметров окружающей матрицы. Это обстоятельство позволяет моделировать квантовые точки (квантовые нити) включениями с собственной пластической деформацией ε_m, вызванной несоответствием параметров решеток. Энергия упругих искажений, вносимых такими включениями, пропорциональна их объему [4] и гипотетически может достигать неограниченно больших значений. Очевидно, что должны существовать механизмы сброса упругой энергии этими включениями. Среди таких механизмов отметим: a) зарождение на границе включения и окружающей его матрицы призматической дислокационной петли несоответствия [5] подобно тому, как это происходит на границе несоответствия пленки и подложки (см., например, [6,7]); b) выброс призматической дислокационной петли из включения в окружающую матрицу [8–10]. Поскольку типичной гетероструктурой является упругонапряженная пленка, находящаяся в контакте с подложкой, возникает необходимость анализа указанных выше механизмов сброса упругой энергии квантовыми точками, внедренными в такую гетероструктуру.

В данной работе выявляются условия зарождения призматических дислокационных петель несоответствия в квантовых точках. Анализируется влияние параметра несоответствия между пленкой и подложкой на зависимость критического радиуса квантовой точки (при котором возникновение дислокационной петли становится энергетически выгодным) от ее собственной пластической деформации. Рассматриваемая задача продолжает исследование проблемы зарождения дислокационной петли несоответствия на границе включения в ненапряженной матрице [5].

Среди исследований, посвященных сходным проблемам в квантовых нитях, отметим работы по зарождению дислокаций несоответствия, параллельных оси нити с треугольным, круговым и прямоугольным сечениями [11–13]. В работе [13] проанализировано зарождение прямоугольной дислокационной петли в квантовой нити вблизи свободной поверхности. Родственными также можно считать задачи о зарождении дислокаций несоответствия на границе между пленкой и подложкой в телах сферической [14] и цилиндрической [15] формы. Для напряженных островков, размещенных на подложке, модели зарождения дислокаций несоответствия были предложены в работах [16–18].

В нашем рассмотрении сфероидальное включение радиуса $R_{\rm sp}$, моделирующее квантовую точку, находится в гетероструктуре пленка–подложка (рис. 1). Параметр кристаллической решетки пленки $a_{\rm film}$ отличен от параметра решетки подложки $a_{\rm sub}$. Это отличие характеризуется параметром несоответствия $f = (a_{\rm sub} - a_{\rm film})/a_{\rm film}$ и является причиной возникновения механических напряжений в гетероструктуре. В приближении, когда подложка полубесконечна, а пленка имеет конечную толщину t, напряжения постоянны и сосредоточены в пленке:

$$\sigma_{xx}^{\rm misf} = \sigma_{yy}^{\rm misf} = \frac{2G(1+\nu)f}{(1-\nu)}, \quad 0 \le z \le t. \qquad (1)$$

Рассмотрим зарождение призматической дислокационной петли несоответствия во включении, расположенном достаточно далеко от свободной поверхности. Это существенно упрощает расчеты и анализ влияния

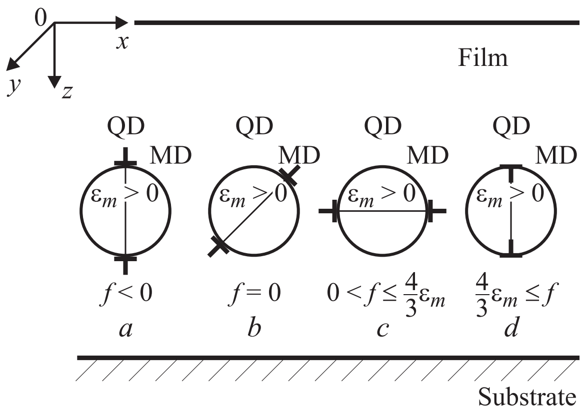

Рис. 1. Призматическая дислокационная петля несоответствия (MD) в квантовой точке (QD), находящейся в гетерослое. a–d — варианты ориентации и типов MD. ε_m — величина собственной пластической дилатации QD, f — параметр несоответствия кристаллических решеток пленки и подложки.

напряженного состояния пленки на появление призматической дислокационной петли на границе включения. Свободная поверхность заметно влияет на упругие поля и энергии включения и дислокационной петли, а следовательно, и на релаксационные процессы, протекающие во включении, только когда рассматриваемый дефект находится в приповерхностном слое толщиной порядка своего радиуса. При более детальном исследовании влияние свободной проверхности будет учтено.

В сфероиде определена пластическая дисторсия β^*_{ij}, вызванная несоответствием параметров кристаллических решеток материала сфероида a_{sp} и окружающего материала пленки a_{film}:

$$\beta^*_{xx} = \beta^*_{yy} = \beta^*_{zz} = \varepsilon_m \delta(\Omega_{\text{sp}}), \tag{2}$$

где $\varepsilon_m = (a_{\text{sp}} - a_{\text{film}})/a_{\text{film}}$, $\delta(\Omega_{\text{sp}})$ — дельта-функция Дирака для области Ω_{sp}, занимаемой сфероидом. Она определяется следующим образом:

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

Знак параметра ε_m соответствует характеру дилатации: $\varepsilon_m > 0$ при расширении, $\varepsilon_m < 0$ при сжатии.

Напряжения внутри сферического включения ${}^{\infty}\sigma_{ij}$, находящегося в бесконечной среде, имеют вид [4]

$$\sigma^{(\text{in})}_{xx} = \sigma^{(\text{in})}_{yy} = \sigma^{(\text{in})}_{zz} = -\frac{4G\varepsilon_m(1+\nu)}{3(1-\nu)}, \tag{3}$$

где G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона.

Энергетическое условие зарождения петли на поверхности включения представляется неравенством

$$E_{\text{loop}} + W_{\text{sp-loop}} + W_{\text{loop-film}} \leq 0, \tag{4}$$

где E_{loop} — упругая энергия призматической дислокационной петли, $W_{\text{sp-loop}}$ — энергия упругого взаимодействипя сфероида и петли, $W_{\text{loop-film}}$ — энергия упругого взаимодействия петли с полем напряжений пленки.

Упругая энергия круговой призматической дислокационной петли имеет вид [9]

$$E_{\text{loop}} = \frac{Gb^2 r_{\text{loop}}}{2(1-\nu)}\left(\ln\frac{8r_{\text{loop}}}{r_{\text{core}}} - 2\right). \tag{5}$$

Здесь b — величина вектора Бюргерса дислокационной петли, r_{loop} — радиус петли, r_{core} — радиус ядра дислокации. Для учета энергии ядра дислокации в (5) полагается, что $r_{\text{core}} = b/\alpha$ (α — эмпирическая постоянная, зависящая от материала; например, для неметаллов $\alpha = 4$) [20]:

$$E_{\text{loop}} = \frac{Gb^2 r_{\text{loop}}}{2(1-\nu)} \ln\left(\frac{1.08\alpha r_{\text{loop}}}{b}\right). \tag{6}$$

Энергия взаимодействия петли с включением $W_{\text{sp-loop}}$ и энергия взаимодействия петли с полем напряжений пленки $W_{\text{loop-film}}$ определяются как работа по созданию петли в поле напряжений включения и пленки соответственно. Рассмотрим случай, когда на границе включения, имеющего $\varepsilon_m > 0$, зарождается призматическая петля вычитания. Это энергетически выгодно (см. условие (4)), когда параметр несоответствия f принимает отрицательные или небольшие положительные значения,

$$W_{\text{sp-loop}} = -\int\limits_{V_{\text{loop}}} \beta^{*\text{loop}}_{ij}\sigma^{(\text{in})}_{ij} dV = -\int\limits_{S_{\text{loop}}} (-b)\sigma^{(\text{in})}_{jj} dS$$
$$= -\frac{4\pi G(1+\nu)\varepsilon_m}{3(1-\nu)} b r^2_{\text{loop}}, \tag{7}$$

$$W_{\text{loop-film}} = -\int\limits_{V_{\text{loop}}} \beta^{*\text{loop}}_{ij}\sigma^{\text{misf}}_{ij} dV$$

$$= \begin{cases} 0, & \beta^{*\text{loop}}_{zz} = -b\delta(z-z_0)H(1-\gamma_1), \quad (8) \\ +\frac{2\pi Gb(1+\nu)f}{(1-\nu)} b r^2_{\text{loop}}, & \beta^{*\text{loop}}_{xx} = -b\delta(x-x_0)H(1-\gamma_2). \quad (9) \end{cases}$$

Здесь $\delta(z-z_0)$ и $\delta(x-x_0)$ — дельта-функции Дирака, $H(1-\gamma_1)$ и $H(1-\gamma_2)$ — функции Хевисайда, $\gamma_1 = \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}/r_{\text{loop}}$, $\gamma_2 = \sqrt{(z-z_0)^2 + (y-y_0)^2}/r_{\text{loop}}$, (x_0, y_0, z_0) — координаты центра петли.

Отметим, что зародившаяся петля имеет радиус, равный радиусу включения $r_{\text{loop}} = R_{\text{p}}$. Энергия взаимодействия петли с полем напряжений в пленке анализируется в двух случаях: a) плоскость петли параллельна плоскости границы между пленкой и подложкой (плоскости интерфейса) (8); b) плоскость петли перпендикулярна плоскости интерфейса (9) (рис. 1).

На основе выражений (4), (6)–(9) и с учетом того, что $r_{\text{loop}} = R_{\text{sp}}$, получаем уравнение для определения критического радиуса включения R_c, при котором энергетически выгодно зарождение призматической дислока-

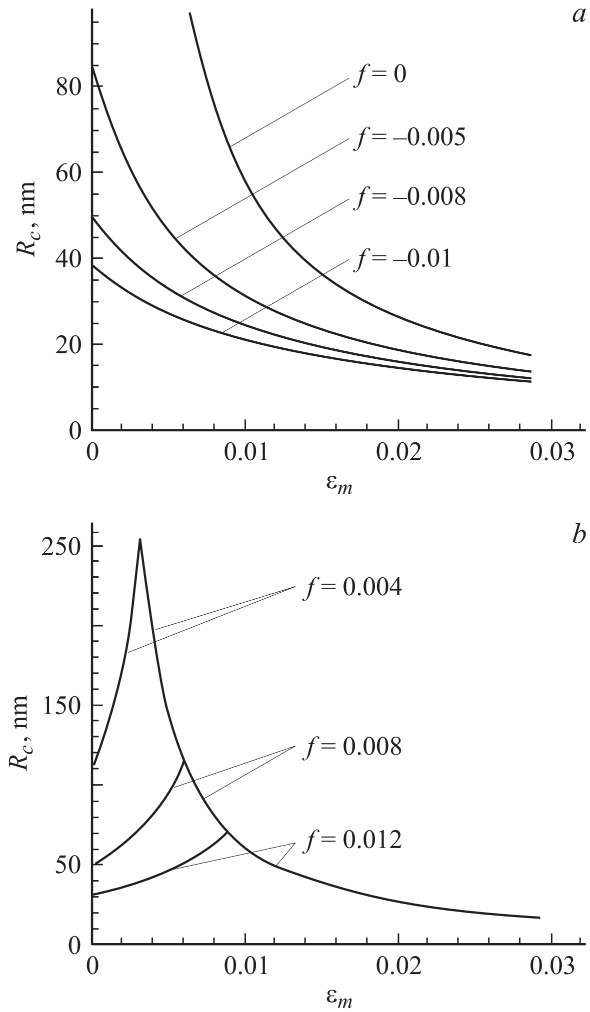

Рис. 2. Зависимость критического радиуса квантовой точки R_c от величины собственной пластической дилатации ε_m при различных параметрах несоответствия f. Величина вектора Бюргерса дислокационной петли $b = 0.3$ nm, константа вклада энергии ядра дислокации $\alpha = 4$, коэффициент Пуассона $\nu = 0.3$.

ционной петли несоответствия,

$$R_c = \frac{3b}{4\pi(1+\nu)(2\varepsilon_m - 3f^*)} \ln\left(\frac{1.08\alpha R_c}{b}\right), \qquad (10)$$

где $f^* = 0$, когда плоскость петли параллельна плоскости интерфейса, и $f^* = f$, когда плоскость петли перпендикулярна плоскости интерфейса. Из (10) следует, что при $f < 0$ энергетически выгодно зарождение петли, перпендикулярной границе интерфейса. При этом поля напряжений в пленке (при $f < 0$ они сжимающие) способствуют образованию локальной неоднородности в виде дислокационной петли несоответствия на границе включения (при $\varepsilon_m > 0$ напряжения внутри включения также сжимающие). Включение в такой пленке приобретает петлю несоответствия при меньших радиусах по сравнению с включением, находящимся в ненапряженной матрице ($f = 0$) (рис. 2, a). Отметим, что в отсутствие напряжений в пленке ($f = 0$) в рамках упругой континуальной модели петля несоответствия во включении может быть произвольно ориентирована в пространстве. Интересна ситуация, когда $f > 0$. Согласно (10), существует единственная возможность: петля расположена параллельно плоскости интерфейса ($f^* = 0$). Однако при достаточно больших положительных напряжениях в пленке во включении энергетически выгоднее зарождение петли внедрения, так как именно она уменьшает общую упругую энергию системы (см. условие (4)). В этом случае уравнение для критического радиуса включения имеет вид

$$R_c = \frac{3b}{4\pi(1+\nu)(3f - 2\varepsilon_m)} \ln\left(\frac{1.08\alpha R_c}{b}\right). \qquad (11)$$

Критерием образования петли внедрения является условие $3f > 4\varepsilon_m$ ($\varepsilon_m > 0$).

Таким образом, проведенный анализ выявляет следующие возможные варианты для образования петли несоответствия во включении с собственной пластической дилатацией $\varepsilon_m > 0$, находящемся в пленке, нанесенной на подложку.

1) Если параметр несоответствия между пленкой и подложкой $f < 0$, во включении образуется призматическая дислокационная петля вычитания, плоскость которой перпендикулярна границе интерфейса (рис. 1, a). Критический радиус включения определяется из условия (10) (рис. 2, a).

2) Если $f = 0$, во включении образуется призматическая дислокационная петля вычитания, плоскость которой произвольно ориентирована в пространстве (рис. 1, b). Критический радиус включения также определяется из условия (10) (рис. 2, a).

3) Если $0 < f < \frac{4}{3}\varepsilon_m$, во включении образуется призматическая дислокационная петля вычитания, плоскость которой параллельна границе интерфейса (рис. 1, c). Критический радиус включения определяется из условия

$$R_c = \frac{3b}{8\pi(1+\nu)\varepsilon_m} \ln\left(\frac{1.08\alpha R_c}{b}\right). \qquad (12)$$

Зависимость $R_c(\varepsilon_m)$ иллюстрируется кривой, показанной на рис. 2, a при $f = 0$.

4) Если $f = \frac{4}{3}\varepsilon_m$, во включении образуется либо призматическая дислокационная петля вычитания, плоскость которой параллельна границе интерфейса (рис.1, c), либо призматическая дислокационная петля внедрения, плоскость которой перпендикулярна границе интерфейса (рис. 1, d). Критический радиус включения определяется из условия (12) (рис. 2, a).

5) Если $f > \frac{4}{3}\varepsilon_m$, во включении образуется призматическая дислокационная петля внедрения, плоскость которой перпендикулярна границе интерфейса (рис. 1, d). Критический радиус включения определяется из условия (11) (рис. 2, b).

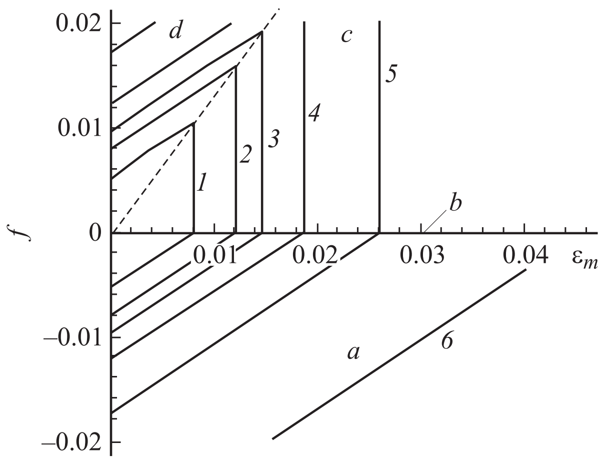

Рис. 3. Изоконтуры критических радиусов включения R_c (R_c, nm: *1* — 80, *2* — 50, *3* — 40, *4* — 30, *5* — 20, *6* — 10) в зависимости от собственной пластической дилатации ε_m и параметра несоответствия f. Области a–d соответствуют ориентациям дислокационной петли несоответствия, показанным на рис. 1. Величина вектора Бюргерса дислокационной петли $b = 0.3$ nm, константа вклада энергии ядра дислокации $\alpha = 4$, коэффициент Пуассона $\nu = 0.3$.

На рис. 3 представлены изоконтуры критических радиусов в координатной системе $\varepsilon_m - f$. Выделены области $a-d$, отвечающие положениям дислокационной петли, изображенным на рис. 1.

Анализ зарождения дислокационной петли несоответствия для включений с $\varepsilon_m < 0$ аналогичен изложенному выше и приводит к зеркальному результату.

Проведенный теоретический анализ позволяет сделать вывод, что напряжения в пленке, обусловленные параметром несоответствия f в системе пленка–подложка, существенно влияют не только на величину критического радиуса квантовой точки, при котором энергетически выгодно зарождение дислокационной петли несоответствия, но и на ориентацию такой петли по отношению к границе интерфейса и тип самой петли (петля вычитания или внедрения).

Список литературы

[1] A.D. Andreev, E.P. O'Reilly. Phys. Rev. B **62**, 15 851 (2000).
[2] P. Waltereit, A.E. Romanov, J.S. Speck. Appl. Phys. Lett. **81**, 4754 (2002).
[3] N. Usami, T. Ichitsubo, T. Ujihara, T. Takanashi, K. Fujiwara, G. Sazaki, K. Nakajima. J. Appl. Phys. **94**, 916 (2003).
[4] T. Mura. Mircomechanics of Defects in Solids. Martinus Nijhoff, Boston (1987). 587 p.
[5] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. Письма в ЖТФ **30**, 89 (2004).
[6] В.И. Владимиров, М.Ю. Гуткин, А.Е. Романов. ФТТ **29**, 2750 (1987).
[7] R. Beanland, D.J. Dunstan, P.J. Goodhew. Adv. Phys. **45**, 87 (1996).
[8] Н.Д. Захаров, В.Н. Рожанский, Р.Л. Корчажкина. ФТТ **16**, 1444 (1974).
[9] V.V. Chaldyshev, N.A. Bert, A.E. Romanov, A.A. Suvorova, A.L. Kolesnikova, V.V. Preobrazhenskii, M.A. Putyato, B.R. Semyagin, P. Werner, N.D. Zakharov, A. Claverie. Appl. Phys. Lett. **80**, 377 (2002).
[10] Н.А. Берт, А.Л. Колесникова, А.Е. Романов, В.В. Чалдышев. ФТТ **44**, 2139 (2002).
[11] T.J. Gosling, L.B. Freund. Acta Mater. **44** 1 (1996).
[12] J. Colin, J. Grihle. Phil. Mag. Lett. **82**, 125 (2002).
[13] M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. J. Phys.: Cond. Matter **15**, 3539 (2003).
[14] L.I. Trusov, M.Yu. Tanakov, V.G. Gryasnov, A.M. Kaprelov, A.E. Romanov. J. Cryst. Growth **114**, 133 (1991).
[15] M.Yu. Gutkin, A.G. Sheinerman. Phys. Stat. Sol. (a) **184**, 485 (2001).
[16] E. Pehlke, N. Moll, A. Kley, M. Scheffler. Appl. Phys. A **65**, 525 (1997).
[17] K. Tillmann, A. Foster. Thin Solid Films **368**, 93 (2000).
[18] I.A. Ovid'ko. Phys. Rev. Lett. **88**, 046 103 (2002).
[19] J. Dundurs, N.J. Salamon. J. Phys. C **50**, 125 (1972).
[20] J. Hirth, J. Lothe. Theory of Dislocations. Wiley, N.Y. (1982). 752 p.