

## ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ДИСЛОКАЦИИ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

*И. А. Овидько\*, А. Г. Шейнерман*

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

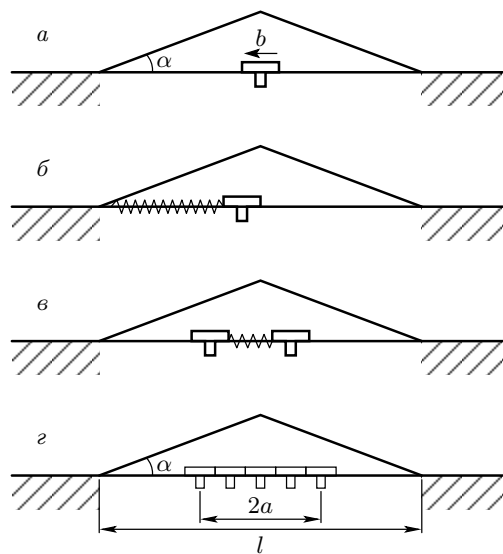
Поступила в редакцию 24 июня 2003 г.

Предложена теоретическая модель, описывающая зарождение дислокаций несоответствия с делокализованными ядрами в островковых пленках. Проведена оценка параметров наностроек (квантовых точек) с делокализованными дислокациями несоответствия в системе Ge/Si. В рамках предложенной модели показано, что зарождение делокализованных дислокаций несоответствия в квантовых точках в широком интервале их параметров энергетически более выгодно, чем зарождение совершенных дислокаций несоответствия (обычно рассматриваемых в моделях квантовых точек с дислокациями).

PACS: 68.65.Nb, 61.72.Bb, 61.72.Ji, 61.72.Lk

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы пространственно-упорядоченные ансамбли полупроводниковых наностроек (квантовых точек) являются предметом интенсивных исследований фундаментального и прикладного характера, см., например, [1–15]. Функциональные свойства полупроводниковых наностроек, имеющих широкие перспективы применения в электронике и оптоэлектронике, существенным образом зависят от дефектной структуры наностроек. В частности, зарождение дислокаций несоответствия (ДН) в наностройках приводит к деградации их уникальных свойств [2]. Это обуславливает значимость определения критических параметров наностроек, при которых ДН зарождаются в наностройках (рис. 1). Полные, частичные и расщепленные ДН в наностройках (рис. 1а, б, в) являются аналогами соответственно полных [16–25], частичных и расщепленных [26–30] ДН в непрерывных пленках. Каждая конфигурация частичных и расщепленных ДН включает одну или две частичных ДН (с векторами Бюргерса, которые не являются векторами кристаллических решеток наностройка или подложки) и дефект упаковки (рис. 1б, в). В общем случае в непрерывных кристаллических пленках возможно также зарождение ДН нового типа,



**Рис. 1.** Типы дислокаций несоответствия в пирамидальном наностройке на подложке: а) полная дислокация с линейным ядром, б) частичная дислокация с линейным ядром и дефектом упаковки, в) расщепленная дислокация, состоящая из двух частичных дислокаций (с линейными ядрами) и дефекта упаковки между ними, г) делокализованная дислокация с вектором Бюргерса, равномерно распределенным вдоль ее ядра (полосы конечной ширины)

\*E-mail: ovidko@def.ipme.ru

а именно, делокализованных ДН с вектором Бюргера, «размазанным» вдоль протяженного дислокационного ядра [31]. Такие ДН, которые в дальнейшем мы будем называть делокализованными ДН, рассматривались только в случае непрерывных пленок [31]. До последнего времени теоретические модели зарождения ДН в наноструктурах рассматривали только совершенные (полные) ДН (рис. 1а) (см., например, [13–15]). Недавно были предложены теоретические модели [32, 33], описывающие зарождение частичных и расщепленных ДН в наноструктурах. Основная цель настоящей работы – теоретический анализ условий зарождения делокализованных ДН (рис. 1б) в наноструктурах.

## 2. ДЕЛОКАЛИЗОВАННАЯ ДИСЛОКАЦИЯ В НАНООСТРОВКЕ. МОДЕЛЬ

Рассмотрим гетероэпитаксиальную систему, состоящую из островка и полубесконечной подложки (рис. 1). Наноструктура имеет форму правильной пирамиды с квадратным основанием со стороной  $l$  и углом наклона боковой грани  $\alpha$ . Наноструктура и подложка предполагаются упруго изотропными материалами с одинаковыми модулями сдвига  $G$  и коэффициентами Пуассона  $\nu$ . В рамках модели граница островка и подложки характеризуется одномерным несоответствием  $f$ , определяемым выражением  $f = 2(a_i - a_s)/(a_i + a_s)$ , где  $a_i$  и  $a_s$  – параметры кристаллических решеток соответственно островка и подложки. Несоответствие  $f$  будем моделировать краевыми дислокациями (называемыми в дальнейшем когерентными дислокациями) с векторами Бюргера  $db_{e_x}$ , непрерывно распределенными вдоль межфазной границы с линейной плотностью  $f/db$ .

Из-за различия между параметрами кристаллических решеток наноструктура и подложки в наноструктуре возникают напряжения несоответствия. Релаксация напряжений несоответствия в наноструктурах и тонких пленках обычно происходит за счет зарождения ДН и их конфигураций [13–33]. Наиболее распространенный тип ДН – это полные [13–25], иногда частичные и расщепленные [26–30, 32, 33] ДН. Наряду с такими ДН, в тонких пленках возможно также зарождение делокализованных ДН [31]. Каждая такая ДН характеризуется вектором Бюргера, распределенным вдоль протяженного дислокационного ядра, имеющего форму полосы конечной ширины (в отличие от полных и частичных дислокаций, имеющих линии в качестве ядер). В на-

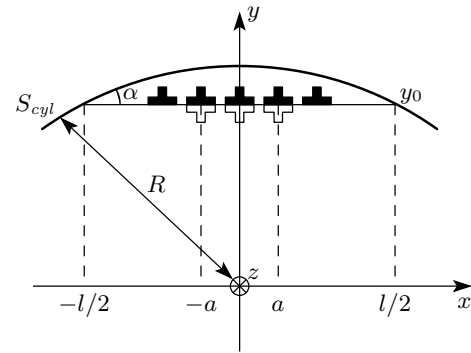


Рис. 2. Дислокация несоответствия с делокализованным ядром в двухфазном цилиндре с плоской границей раздела фаз (островка и подложки). Несоответствие параметров кристаллических решеток и делокализованная дислокация несоответствия моделируются непрерывным распределением когерентных дислокаций (показаны черным) и антикогерентных дислокаций (показаны белым)

стоящей работе исследуются характеристики делокализованных ДН в наноструктурах, условия зарождения которых в наноструктурах отличны от таковых (рассматривавшихся в работе [31]) в обычных тонких пленках. Различие в условиях зарождения ДН обусловлено различием в геометрии наноструктур и тонких пленок. В частности, в силу геометрии наноструктура делокализованная ДН может зарождаться на межфазной границе наноструктура-подложка вблизи линии пересечения этой границы и боковой свободной поверхности наноструктура (рис. 1б). При этом боковая свободная поверхность существенным образом экранирует поле напряжений ДН, что уменьшает упругую энергию ДН и облегчает ее зарождение в наноструктуре.

Рассмотрим подробно формирование на границе островка и подложки полной ДН с делокализованным ядром (рис. 1б). В общем случае такой дефект представляет собой некоторое неоднородное непрерывное распределение дислокаций по участку границы островка и подложки. Однако для простоты будем моделировать ДН с делокализованным ядром однородным распределением дислокаций (в дальнейшем называемых антикогерентными).

Зарождение ДН с делокализованным ядром энергетически выгодно, если разность  $\Delta W$  энергии островка с ДН и его энергии в когерентном состоянии отрицательна. Точный аналитический расчет энергии островка с дислокацией на подложке требует аналитических выражений для полей напряжений краевой дислокации возле свободной по-

верхности, образованной свободными поверхностями островка и подложки (рис. 1з). Ввиду отсутствия таких выражений для расчета энергии, связанной с образованием в островке ДН, будем моделировать подложку с островком упругим цилиндром радиуса  $R$  и бесконечной длины (рис. 2). В рамках модели граница раздела островка и подложки представляет собой полосу, которая пересекает цилиндр параллельно его оси под углом  $\alpha$  к его поверхности. Угол  $\alpha$  соответствует углу между основанием реального островка и его боковой гранью. В системе координат, изображенной на рис. 2, граница островка и подложки занимает область ( $|x| < l/2 = R \sin \alpha$ ,  $y = y_0 = R \cos \alpha$ ). Дислокации несоответствия моделируются антикогерентными дислокациями, равномерно распределенными по области  $|x| < a$  границы островка и подложки с линейной плотностью  $1/2a$ .

### 3. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДЕЛОКАЛИЗОВАННОЙ ДИСЛОКАЦИИ НЕСООТВЕТСТВИЯ В НАНООСТРОВКЕ

Найдем изменение  $\Delta W$  энергии системы, связанное с образованием на границе островка и подложки ДН с делокализованным ядром (на единицу ее длины). Величина  $\Delta W$  представима в виде

$$\Delta W = W^d + W^{d-f} + W^c, \quad (1)$$

где  $W^d$  — собственная энергия ДН,  $W^{d-f}$  — энергия ее взаимодействия с полем упругих напряжений несоответствия, а  $W^c$  — энергия ядра ДН.

Собственная энергия  $W^d$  ДН рассчитывается как энергия взаимодействия антикогерентных дислокаций с векторами Бюргера  $-b/(2a) dx \mathbf{e}_x$ , где  $b = a_i$  — расстояние между атомами в островке:

$$W^d = \frac{1}{2} \left( \frac{b}{2a} \right)^2 \int_{-a}^a \int_{-a}^a g(x, x') dx dx', \quad (2)$$

где  $g(x, x')$  — энергия взаимодействия двух параллельных дислокаций (расположенных в точках  $x$  и  $x'$ ) с единичными векторами Бюргера  $\mathbf{b} = -\mathbf{e}_x$ . Энергия  $g(x, x')$  рассчитывается с помощью выражения [23] для функции напряжений дислокации в цилиндре как  $g(x, x') = \tilde{g}(2 \sin \alpha x/l, 2 \sin \alpha x'/l)$ , где

$$g(\tilde{x}, \tilde{x}') = D \{ (M - 1) [1 - 2\tilde{y}_0^2 (M + 1)] - \ln M \}, \quad (3)$$

$$M = \frac{(\tilde{x} - \tilde{x}')^2}{\tilde{y}_0^4 + (\tilde{x}^2 + \tilde{x}'^2 - 2)\tilde{y}_0^2 + (\tilde{x}\tilde{x}' - 1)^2}, \quad (4)$$

$$\tilde{y}_0 = 2 \sin \alpha y_0/l, \text{ а } D = G/[2\pi(1 - \nu)].$$

Энергия  $W^{d-f}$  взаимодействия ДН с напряжениями несоответствия рассчитывается как энергия взаимодействия когерентных дислокаций с антикогерентными дислокациями:

$$W^{d-f} = -\frac{b}{2a} f \int_{-a}^a \int_{-l/2}^{l/2} g(x, x') dx dx'. \quad (5)$$

Энергия ядра ДН связана с искажением химических связей на межфазной границе в результате образования ДН. Следуя работе [31], представим эту энергию в виде

$$W^c = 2a\Delta\gamma, \quad (6)$$

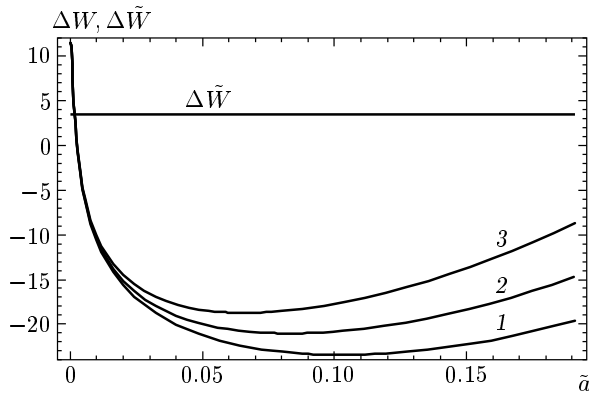
где  $\Delta\gamma$  — изменение удельной поверхностной энергии межфазной границы в результате образования на ней ДН с делокализованным ядром.

Подставляя формулы (2), (5) и (6) в (1), получаем

$$\Delta W = \frac{b^2}{8} \left\{ \frac{1}{\tilde{a}^2} \int_{-\tilde{a}}^{\tilde{a}} \left[ \int_{-\tilde{a}}^{\tilde{a}} \tilde{g}(\tilde{x}, \tilde{x}') d\tilde{x}' - \frac{4a}{b} f \times \int_{-\sin \alpha}^{\sin \alpha} g(\tilde{x}, \tilde{x}') d\tilde{x}' \right] d\tilde{x} + \frac{16a\Delta\gamma}{b^2} \right\}, \quad (7)$$

где  $\tilde{a} = 2a \sin \alpha/l$ .

Для расчета  $\Delta W$  внутренние интегралы в формуле (7) были взяты аналитически, а внешний интеграл — численно. Зависимости  $\Delta W(\tilde{a})$  в интервале  $0 < a < l/2$  приведены на рис. 3 для различных значений  $\Delta\gamma$  при  $l = 100b$  и  $\alpha = 11^\circ$  для островков Ge/Si, характеризуемых следующими значениями параметров:  $f = 0.042$ ,  $b = 0.566$  нм,  $G = 40$  ГПа,  $\nu = 0.26$ . Для сравнения горизонтальной линией на рис. 3 показано изменение энергии  $\Delta\tilde{W}$ , связанное с образованием в центре основания такого островка полной ДН с локализованным ядром. Как следует из рис. 3, существует некоторая равновесная длина  $\tilde{a} = \tilde{a}_0$  дефекта, соответствующая минимуму  $\Delta W$ . Величина  $\tilde{a}_0$  уменьшается с ростом  $\Delta\gamma$ . При любом значении  $\Delta\gamma$ , не превышающем удельной энергии  $0.066$  Дж/м<sup>2</sup> дефекта упаковки в системе Ge/Si,  $\Delta W(\tilde{a}_0) < 0$  и  $\Delta W(\tilde{a}_0) < \Delta\tilde{W}$ , т. е. формирование в островке ДН с делокализованным ядром является энергетически выгодным процессом. Таким образом, аккомодация напряжений несоответствия путем зарождения в островке ДН с делокализованным ядром является альтернативой формированию



**Рис. 3.** Зависимости изменения энергии  $\Delta W$ , связанного с образованием в островке делокализованной дислокации, от безразмерной полуширины  $\tilde{a}$  этого дефекта для  $\Delta\gamma = 0, 0.03$  и  $0.066$  Дж/м<sup>2</sup> (кривые 1, 2 и 3 соответственно). Горизонтальная линия показывает изменение энергии  $\Delta\tilde{W}$  в результате формирования в центре основания островка дислокации с локализованным ядром. Величины  $\Delta W$  и  $\Delta\tilde{W}$  приведены в единицах  $Db^2/8$

в нем локализованной дислокации и может происходить даже в островках небольшого размера, где формирование обычных дислокаций энергетически невыгодно.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе проведен теоретический анализ условий зарождения делокализованных ДН (дефектов несоответствия нового типа) в квантовых точках (наноостровках). Теоретически выявлено, что зарождение делокализованных ДН (рис. 1*з*) является энергетически предпочтительным в наноостровках в системе Ge/Si в широком интервале их структурных и геометрических параметров, по сравнению с зарождением обычных полных ДН (рис. 1*а*). Этот результат обуславливает интерес к проведению экспериментов по идентификации типа ДН в наноостровках, поскольку различные ДН, вообще говоря, чувствительны к различным параметрам структуры, химического состава и технологии получения наноостровков. В частности, условия зарождения делокализованных ДН (рис. 1*з*) существенным образом зависят от энергии искажения химических связей в протяженном ядре такой дислокации, в отличие от совершенных ДН (рис. 1*а*). Идентификация типа ДН и критических параметров, контролирующих их зарождение в

наноостровках, открывает возможности для совершенствования технологий получения ансамблей наноостровков с улучшенными функциональными характеристиками. Кроме того, выявление различных типов ДН в наноостровках представляет интерес для развития фундаментальных представлений физики дефектов в наноструктурных твердых телах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 01-02-16853), Санкт-Петербургского научного центра РАН, а также в рамках программы «Интеграция» (грант № В0026).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. V. A. Shchukin and D. Bimberg, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1125 (1999).
2. Н. Н. Леденцов, В. М. Устинов, В. А. Щукин et al., *ФТП* **32**, 385 (1998).
3. D. Kouris, A. Peralta, and K. Sieradzki, *Surf. Sci.* **445**, 420 (2000).
4. P. Sutter and M. G. Lagally, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4637 (2000).
5. A. Bouret, *Surf. Sci.* **432**, 37 (1999).
6. B. Voigtländer and N. Theuerkauf, *Surf. Sci.* **461**, L575 (2000).
7. I. A. Ovid'ko and A. G. Sheinerman, *Appl. Phys. A* **74**, 273 (2002).
8. D. E. Jesson, M. Kästner, and B. Voigtländer, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 330 (2000).
9. T. I. Kamins, E. C. Karr, R. S. Williams et al., *J. Appl. Phys.* **81**, 211 (1997).
10. S. A. Chaparro, J. Drucker, Y. Zhang et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1199 (1999).
11. S. A. Chaparro, Y. Zhang, J. Drucker et al., *J. Appl. Phys.* **87**, 2245 (2000).
12. J. Tersoff, C. Teichert, and M. G. Lagally, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1675 (1996).
13. E. Pehlke, N. Moll, A. Kley et al., *Appl. Phys. A* **65**, 525 (1997).
14. H. T. Johnson and L. B. Freund, *J. Appl. Phys.* **81**, 6081 (1997).
15. R. V. Kukta and L. B. Freund, *J. Mech. Phys. Sol.* **45**, 1835 (1997).

16. E. A. Fitzgerald, Mater. Sci. Rep. **7**, 87 (1991).
17. J. H. van der Merve, Crit. Rev. Sol. St. Mater. Sci. **17**, 187 (1991).
18. S. C. Jain, A. H. Harker, and R. A. Cowley, Phil. Mag. A **75**, 1461 (1997).
19. М. Ю. Гуткин, И. А. Овидько, *Дефекты и механизмы пластичности в наноструктурных и некристаллических материалах*, Янус, Санкт-Петербург (2001).
20. T. J. Gosling and J. R. Willis, Phil. Mag. A **69**, 65 (1994).
21. F. Bailly, M. Barbé, and G. Cohen-Solal, J. Cryst. Growth, **153**, 115 (1995).
22. I. A. Ovid'ko, J. Phys.: Condens. Matter **11**, 6521 (1999); **13**, L97 (2001).
23. M. Yu. Gutkin, I. A. Ovid'ko, and A. G. Sheinerman, J. Phys.: Condens. Matter **12**, 5391 (2000).
24. A. G. Sheinerman and M. Yu. Gutkin, Phys. Stat. Sol. (a) **184**, 485 (2001).
25. S. V. Bobylev, I. A. Ovid'ko, and A. G. Sheinerman, Phys. Rev. B **64**, 224507 (2001).
26. B. C. de Cooman and C. B. Carter, Acta Metall. **37**, 2765 (1989).
27. B. C. de Cooman, C. B. Carter, K. T. Chan et al., Acta Metall. **37**, 2779 (1989).
28. J. Zou and D. J. H. Cockayne, Appl. Phys. Lett. **69**, 1083 (1996).
29. M. Loubradou, R. Bonnet, A. Vila et al., Mater. Sci. Forum **207-209**, 285 (1996).
30. M. Tamura, Appl. Phys. A **63**, 359 (1996).
31. A. E. Romanov, T. Wagner, and M. Rühle, Scripta Mater. **38**, 869 (1998).
32. I. A. Ovid'ko, Phys. Rev. Lett. **88**, 046103 (2002).
33. I. A. Ovid'ko and A. G. Sheinerman, Phys. Rev. B **66**, 245309 (2002).