

УДК 539.1

МНОГОСОЛИТОННЫЙ МЕТОД УДАЛЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ ИЗ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ ГЕТЕРОСТРУКТУР

М.М. АРАКЕЛЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: marakelyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 18 июля 2016 г.)

Разработана теоретическая модель уменьшения плотности дислокаций несоответствия на границе гетероперехода. Модель основана на отталкивании многосолитонной цепочки и одиночной дислокации, вследствие чего происходит удаление дислокации из функциональной области гетероструктуры.

1. Введение

Тонконкопленочные гетероструктуры широко применяются в нанoeлектронике для изготовления полупроводниковых лазеров, оптических модуляторов, СВЧ транзисторов, квантовых компьютеров и т. д. Качество низкоразмерных слоев и резкость гетерограниц оказывают сильное влияние на электрофизические свойства гетероструктуры. Жесткие требования предъявляются к размеру, форме и однородности гетероструктуры. Однако при изготовлении гетероструктур возникают остаточные напряжения, релаксация которых осуществляется путем пластической деформации, в результате чего образуются дислокации несоответствия, находящиеся в плоскости границы раздела. Наличие дислокаций несоответствия ухудшает функциональные свойства гетероструктуры [1]. Вследствие этого задача удаления дислокаций на границе гетеропереходов является актуальной.

Гетероэпитаксиальный рост сопровождается образованием дислокаций, если толщина пленки превышает некоторую критическую. Критическая толщина зависит от рассогласования периодов кристаллических решеток пленки и подложки. Очевидный способ избавления от дислокаций – использование пленок докритической толщины, однако из-за ее малости на практике это не всегда возможно. Одним из методов увеличения критической толщины пленок является предварительная пластическая деформация подложек, приводящая к образованию стенок краевых дислокаций, которые препятствуют зарождению дислокаций несоответствия в гетероструктурах [2].

В работе [3] для увеличения критической толщины пленок на границе между пленкой и подложкой формировались тонкие буферные слои с заданной структурой. В работе [4] предложено удаление дислокации несоответствия из эпитаксиальных пленок через боковые поверхности приложением напряжения несоответствия. В [5] изучались теоретические модели интерфейсов и дефектов несоответствия в поликристаллических и нанокристаллических пленках и вопросы огранки границ зерен действием напряжения несоответствия. Согласно [6], дислокации несоответствия могут быть удалены скольжением к боковым границам под действием «сил изображения». И.А. Овидько предложил теоретическую модель [7], которая описывает новый физический механизм для релаксации напряжений несоответствия в кристаллических пленках, а именно, формирование стенок из краевых дислокаций.

Таким образом, релаксация напряжений несоответствия на фазовой границе гетероструктуры может происходить посредством формирования в ней дислокаций несоответствия, которые оказывают сильное влияние на электронный транспорт, следовательно, могут искажать электрофизические свойства гетероструктур. Усовершенствование имеющихся, а также разработка новых способов удаления дислокаций несоответствия в гетероструктурах особенно важны, так как гетероструктуры являются основными компонентами устройств современной микроэлектроники.

В настоящей работе предложен новый, многосолитонный, подход к решению задачи уменьшения плотности дислокаций несоответствия в гетероструктурах.

2. Удаление дислокаций несоответствия из граничных областей гетероперехода

Простой моделью дислокаций, описывающей динамику цепи частиц, взаимодействующих с ближайшими соседями в присутствии внешнего периодического потенциала, является известная модель дислокаций Френкеля–Конторовой. В этой модели атомы над плоскостью скольжения – материальные точки, связанные пружинами с жесткостью k , а атомы под плоскостью скольжения описываются синусоидальным потенциалом.

Солитоны являются нелинейными образованиями, которые несут важную информацию о структуре среды. Дислокации Френкеля–Конторовой являются структурными дефектами параметра порядка или топологическими солитонами. Их движение описывается уравнением синус-Гордона [8]. Фундаментальными решениями этого уравнения, наряду с другими решениями, являются связанные состояния солитон–солитон, солитон–антисолитон, бризер и т. д. Как известно [9], солитоны, взаимодействующие с периодическим потенциалом решетки, или

связанные состояния солитон–солитон адекватны перегибам, пересекающим потенциальные барьеры. С помощью известных технологий в кристаллах получают цепочки солитонов одного знака [9]. Образец подвергается большой пластической деформации и затем выдерживается в течение нескольких суток при комнатной температуре. В результате беспорядочно переплетенные дислокационные скопления распадаются, и определенная часть дислокаций ориентируется под малыми углами к кристаллографическим направлениям.

В настоящей работе моделируется получение такой цепочки солитонов и изучается воздействие двухсолитонной и многосолитонной цепочек на движение дислокаций. Численным экспериментом исследуется взаимодействие движущейся одиночной дислокации Френкеля–Конторовой с упругим полем дислокационной цепочки, движущейся в том же направлении и с той же скоростью. В этом случае в уравнение синус-Гордона добавляется член, описывающий такое поле, и рассматривается его воздействие на одиночную дислокацию при разных скоростях совместного движения. Двухсолитонное решение невозмущенного уравнения синус-Гордона имеет вид [8]

$$\begin{aligned} \varphi(x, t) = 4 \arctan & \left[\left\{ 1 - \frac{1 - u_1 u_2 - \sqrt{(1 - (u_1)^2)} \sqrt{(1 - (u_2)^2)}}{1 - u_1 u_2 + \sqrt{(1 - (u_1)^2)} \sqrt{(1 - (u_2)^2)}} \right. \right. \\ & \times \exp \left[-\frac{x - x_1 - u_1 t}{\sqrt{(1 - (u_1)^2)}} - \frac{x - x_2 - u_2 t}{\sqrt{(1 - (u_2)^2)}} \right] \Big\} \\ & \left. \left/ \left(\exp \left[-\frac{x - x_1 - u_1 t}{\sqrt{(1 - (u_1)^2)}} \right] + \exp \left[-\frac{x - x_2 - u_2 t}{\sqrt{(1 - (u_2)^2)}} \right] \right) \right], \end{aligned} \quad (1)$$

где u_1 и u_2 – скорости, x_1 и x_2 – начальные фазы и φ – отклонение атома из положения равновесия. С помощью преобразования Беклунда [8] нами найдено также трехсолитонное решение уравнения синус-Гордона. Моделирование двух- и трехсолитонных решений уравнения представлено на рис. 1а, б.

Связанные состояния нескольких солитонов мы рассматриваем как дислокационную цепочку. Уравнение синус-Гордона для дислокаций Френкеля–Конторовой с учетом возмущения со стороны дислокационной цепочки принимает вид

$$\varphi_{tt} - c_0^2 \varphi_{xx} + \omega_0^2 \sin \varphi - \frac{2\pi F_x}{ma} = 0, \quad (2)$$

где c_0 – скорость звука, $\omega_0^2 \equiv \frac{2\pi f_0}{ma}$ – характерная частота, $f = f_0 \sin \frac{2\pi x}{a}$ – перио-

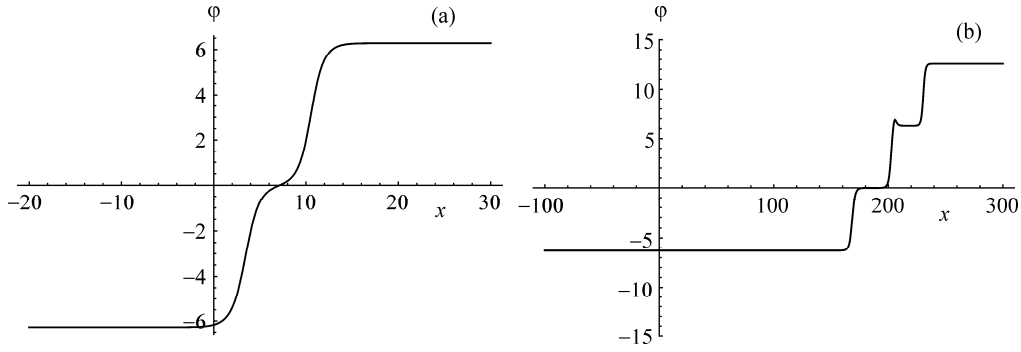


Рис.1. Поле смещений (а) двухсолитонной и (б) трехсолитонной цепочек.

дическая сила, действующая со стороны подложки в модели Френкеля–Конторовой, $f_0 = \frac{mc_0^2 a}{2\pi l_0^2}$ [10], $c_0^2 = \frac{ka^2}{m}$, a – постоянная решетки, F_x – сила, действующая на дислокацию со стороны дислокационной цепочки и l_0 – параметр, увеличивающийся при увеличении жесткости пружины в модели Френкеля–Конторовой и уменьшении силы со стороны подложки.

В плоскости скольжения ($\sigma_{xx} = 0$, $\sigma_{yy} = 0$, $\sigma_{zz} = 0$) действуют только касательные напряжения σ_{xy} (в наших обозначениях σ_x). Деформация является производной от смещения и определяет компоненты напряжения и силы

$$\varepsilon_x = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad \sigma_x = E \varepsilon_x, \quad F_x = b \sigma_x, \quad (3)$$

где ε_x – компонента деформации, σ_x – компонента сдвигового напряжения, F_x – проекция силы, действующей на единицу длины дислокации, b – вектор Бюргерса и E – модуль Юнга.

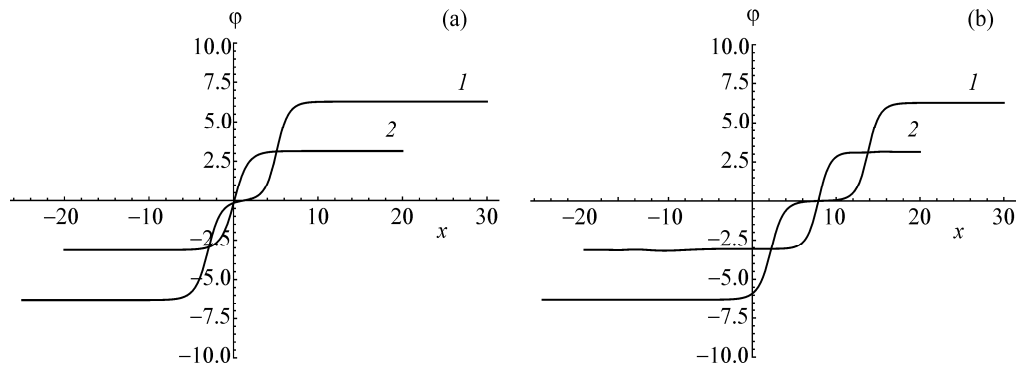


Рис.2. Движение дислокационной стенки (1) и одиночной дислокации (2) при отсутствии взаимодействия между ними для (а) t_1 и (б) t_2 при $t_1 < t_2$.

Решение уравнения (2) найдено численным образом при помощи программы Mathematica. Графики представлены в безразмерных переменных, полученных преобразованиями $x = (c_0/\omega_0)\tilde{x}$ и $t = \tilde{t}/\omega_0$, где $\tilde{t}$, $\tilde{x}$ – безразмерные переменные.

Воздействие поля двухсолитонной цепочки на одиночную дислокацию исследовалось при различных скоростях совместного скольжения. При отсутствии взаимодействия совместное движение такой структуры для последовательных моментов времени представлено на рис.2а,б. Видно, что одиночная дислокация и двухсолитонная цепочка движутся с одинаковой скоростью, не взаимодействуя друг с другом.

При упругом взаимодействии дислокации с дислокационной цепочкой для больших скоростей скольжения численный эксперимент дал результат, представленный на рис.3. Из рис.3 следует, что движение дислокации замораживается полем дислокационной цепочки при больших скоростях скольжения.

Для малых скоростей скольжения получен результат представленный на рис.4. Из рис.4 следует, что при малых скоростях скольжения дислокация выталкивается из занимаемой позиции.

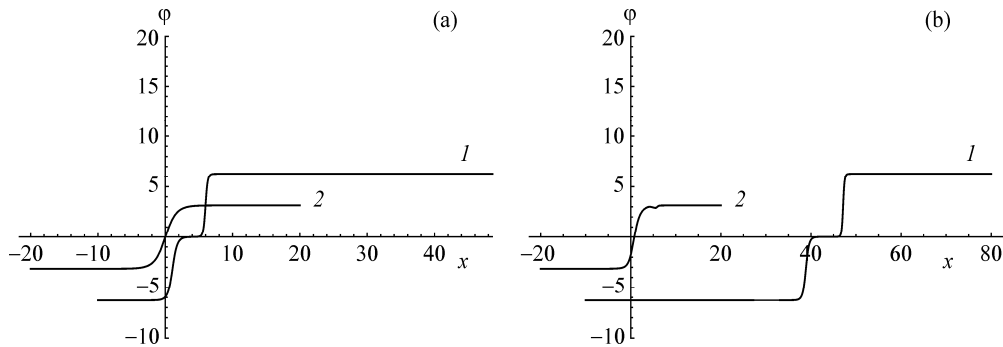


Рис.3. Движение свободной двухсолитонной цепочки (1) и одиночной дислокации (2), находящейся в поле двухсолитонной цепочки для больших скоростей скольжения 9×10^{-1} см/с для (а) t_1 и (б) t_2 при $t_1 < t_2$.

Для объяснения полученных результатов были смоделированы поля напряжений дислокационной цепочки при исследуемых скоростях скольжения, представленные на рис.5.

Из результата численного эксперимента можно заключить, что с увеличением скорости скольжения поле напряжений дислокационной цепочки сжимается в направлении скольжения и увеличивается по амплитуде. Соответственно уменьшается взаимодействие дислокации и дислокационной цепочки в направ-

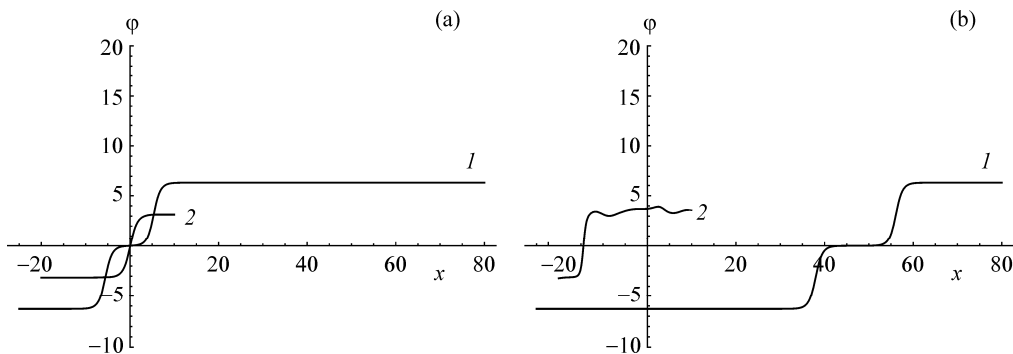


Рис.4. Движение одиночной дислокации (1), находящейся в поле двухсолитонной цепочки (2) для малых скоростей скольжения 3×10^{-1} см/с для (a) t_1 и (b) t_2 при $t_1 < t_2$.

лении скольжения. В выбранном интервале скоростей сила отталкивания дислокационной цепочки и одиночной дислокации растет с уменьшением скорости скольжения. Следовательно, изменяя скорость скольжения, можно регулировать степень воздействия поля дислокационной цепочки на дислокацию.

Таким образом, многосолитонная цепочка является «стопором», отталкивающим дислокацию. В зависимости от соотношения между временем задержки дислокации и временем ее свободного пробега между барьерами, последние можно условно разделить на низкие и высокие, которые действуют как слабые и сильные стопоры. Слабые стопоры эквивалентны существованию силы трения, действующей на дислокацию. Сильные стопоры связаны с высокими и протяженными барьерами.

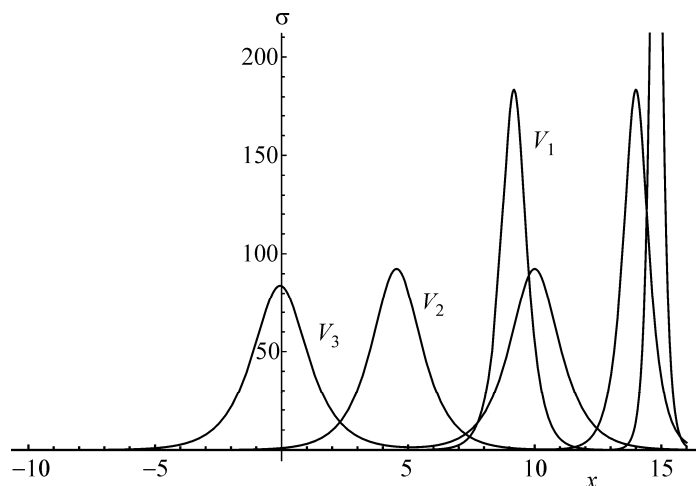


Рис.5. Поля напряжений двухсолитонной цепочки при скоростях скольжения $V_1 > V_2 > V_3$.

На практике используется полубесконечная подложка с цепочками солитонов и пленка. Пленка и подложка – упруго-изотропные твердые тела с одинаковыми модулями сдвига и коэффициентами Пуассона, а также с одинаковыми типами кристаллических решеток и близкими параметрами решеток. В этом случае наличие в подложке многосолитонной цепочки приводит к тому, что на границе пленка–подложка дислокации несоответствия выталкиваются полем цепочки из рабочей области гетероструктуры.

Для применения предложенного метода рекомендуется использование гетероструктуры Co/Cu, в которой критическая толщина достаточно мала, а плотность дислокаций несоответствия большая ($\geq 1.3 \times 10^6 \text{ см}^{-1}$) [11]. Может быть также использована гетероструктура Fe/Cu или другие гетероструктуры с подложками из гранецентрированных кубических металлов, для которых характерна большая плотность дислокаций [12].

Существует другая возможность получения гетероструктур с минимальным количеством дислокаций несоответствия, например, при применении гетероструктур кремний на сапфире. В этом случае получают сапфировые подложки, выращенные специальными методами [13], имеющие определенные, улучшенные, параметры и допускающие эффективное увеличение критической толщины пленки.

Константы при моделировании взяты для меди, так как движение дислокаций в меди (ГЦК решетка) начинается при очень низких нагрузках (при 298 К скорость дислокаций порядка $8 \times 10^2 \text{ см/с}$ при $\sigma \approx 10^6 \text{ дин/см}^2$) и может меняться в зависимости от напряжения в широком интервале [14].

3. Заключение

Движение дислокаций несоответствия в гетероструктурах замораживается полем многосолитонной цепочки при больших скоростях скольжения. При малых скоростях скольжения дислокации выталкиваются многосолитонной цепочкой из рабочей области гетероперехода. Наличие многосолитонной цепочки приводит к тому, что на границе пленка–подложка дислокации несоответствия могут регулируемо выталкиваться из рабочей области гетероструктур, что увеличивает стабильность их свойств и улучшает физические показатели.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ju.A Tkhorik, L.S. Hazan. Plastic Deformation and Misfit Dislocations in the Heteroepitaxial Systems. Kiev, Naukova dumka, 1983.
2. И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман. ФТТ, **44**, 1243 (2002).
3. Y. Obayashi, K. Shintani, J. Appl. Phys., **88**, 105 (2000).
4. I.W. Matthews, A.E. Blakeslee. J. Cryst. Growth, **32**, 265 (1976).
5. M.Ju. Gutkin, I.A. Obid'ko. Materials Physics and Mechanics, **8**, 108, (2009).

6. X.G. Zhang, A. Rodriguez, X. Wang, P. Li, F.C. Jain, J.E. Ayers. Appl. Phys. Lett., **77**, 2524 (2000).
7. I.A. Ovid'ko. J. Phys.: Condens. Matter, **11**, 6521 (1999).
8. Soliton in Action, K.Lonngrén, A. Scott, Eds., Proc. Workshop, Academic Press, New York, San Francisco, London, 1978.
9. В.А. Мелик-Шахназаров, И.И. Мирзоева, И.А. Наскидашвили. Письма в ЖЭТФ, **43**, 247 (1986).
10. М.М. Аракелян. Известия НАН Армении, Физика, **50**, 126 (2015).
11. A.I. Fedorenko, R. Vincent. Phil. Mag., **24**, 55 (1971).
12. K. Yagi, K. Takaynagi, K. Kobayashi, G. Nonio. J. Cryst. Growth, **9**, 84 (1971).
13. Э.А. Назарян, М.М. Аракелян. Известия НАН Армении, Механика, **59**, 74 (2006).
14. Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Москва, Атомиздат, 1972.

ՀԵՏԵՐՈՎԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐԻ ՖՈՒՆԿՑԻՈՆԱԼ ՏԻՐՈՒՅԹԻՑ
ԱՆՀԱՄԱՊԱՏԱՍԽԱՆՈՒԹՅԱՆ ԴԻՍԼՈԿԱՑԻԱՆԵՐԻ ՀԵՌՈՍՏՐԱԿՏ
ԲԱԶՄԱՍՈՒԼԻՏՈՆԱՅԻՆ ՄԵԹՈԴ

Մ.Մ. ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ

Հետերոանցումների սահմաններում անհամապատասխանության դիսլոկացիաների խտության փոքրացման նպատակով մշակված է տեսական մոդել: Այն հիմնված է բազմա-սուլիտոնային շղթայի և միայնակ դիսլոկացիայի վանդոլության վրա, որի հետևանքով տեղի է ունենում դիսլոկացիայի հեռացումը հետերոկառուցվածքի ֆունկցիոնալ տիրույթից:

MULTISOLITONIC METHOD OF MISFIT DISLOCATIONS REMOVAL FROM FUNCTIONAL AREA OF HETEROSTRUCTURES

M.M. ARAKELYAN

The theoretical model of reduction of density of misfit dislocations on the heterostructure border is developed. The model is based on repulsion of a multisoliton chain and single dislocation owing to what there a removal of dislocation from functional area of heterostructure occurs.