

Grzegorz Maciejewski

Zastosowanie metody elementów skończonych  
do wyznaczania rozkładów naprężeń residualnych  
w heterostrukturach

Praca doktorska

wykonana pod kierunkiem dr hab. inż. Pawła Dłużewskiego

Instytut Podstawowych Problemów Techniki  
Polskiej Akademii Nauk

Warszawa 2002



# Spis treści

<b>Wstęp</b>	<b>1</b>
<b>1 Wprowadzenie</b>	<b>5</b>
1.1 Źródła naprężeń w warstwach epitaksjalnych . . . . .	10
1.1.1 Niedopasowanie sieciowe . . . . .	10
1.1.2 Naprężenia termiczne . . . . .	12
1.1.3 Wpływ stanu naprężeń na własności eksploatacyjne . . . . .	13
<b>2 Wyznaczanie naprężeń w heterostrukturach</b>	<b>15</b>
2.1 Metody eksperymentalne . . . . .	15
2.1.1 Pomiary na podstawie zakrzywienia podłoża . . . . .	15
2.1.2 Metoda fotoluminescencji . . . . .	16
2.1.3 Pomiary za pomocą promieni Roentgena . . . . .	17
2.2 Metody analityczne . . . . .	18
2.2.1 Naprężenia wywoływane przez dyslokacje . . . . .	18
2.2.2 Niedopasowanie sieciowe podłoża i warstwy . . . . .	26
2.2.3 Energia dyslokacji niedopasowania . . . . .	29
2.3 Metody numeryczne . . . . .	34
<b>3 Pomiar dystorsji sieci</b>	<b>40</b>
3.1 Obraz struktury . . . . .	40
3.2 Metoda fazy geometrycznej . . . . .	45
<b>4 Proponowana metoda wyznaczania naprężeń</b>	<b>52</b>
4.1 Kinematyka ośrodka z dyslokacjami . . . . .	52
4.1.1 Rozkład gradientu deformacji . . . . .	52
4.1.2 Wektory Burgersa . . . . .	59
4.1.3 Tensory gęstości dyslokacji - miary zdefektowania . . . . .	60
4.2 Termodynamika ośrodka z dyslokacjami . . . . .	63

---

4.2.1	Równania konstytutywne . . . . .	65
4.3	Analiza numeryczna . . . . .	75
4.3.1	Przygotowanie danych wejściowych . . . . .	76
4.3.2	Algorytm metody elementów skończonych . . . . .	78
4.3.3	Wyniki numeryczne . . . . .	81
4.4	Dyskusja . . . . .	90
	<b>Podsumowanie</b>	<b>95</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>96</b>

# Wstęp

Wytwarzanie elementów półprzewodnikowych o coraz mniejszych rozmiarach wymaga wielu interdyscyplinarnych badań, niezbędnych dla zrozumienia zjawisk związanych z ich produkcją i eksploatacją. Złożoność tych zjawisk wymusza również zmiany sposobów modelowania, technik pomiarów czy metod symulacji numerycznych. Metody numeryczne, ze względu na zbliżanie się rozmiarów wytwarzanych elementów do odległości międzyatomowych, ewoluują w kierunku metod dyskretnej symulacji ruchu atomów. Symulacje takie charakteryzują się jednak bardzo dużym zapotrzebowaniem na moc obliczeniową. Dlatego też powstało wiele rozwiązań pośrednich, łączących w sobie zarówno zalety symulacji ruchu pojedynczych atomów, jak i efektywność modelowania opartego na metodach mechaniki ośrodków ciągłych.

Wpływ rozkładu naprężeń w heterostrukturach jest bardzo istotny, ponieważ wiele z własności eksploatacyjnych końcowych produktów zależy właśnie od stanu naprężeń. Jego znajomość pozwala m. in. na wyznaczanie stężenia składników w supersieciach, określenie stopnia zdefektowania struktury, ograniczenie liczby defektów, określenie zmiany struktury pasmowej w zależności od naprężeń czy kontrolę i możliwość modyfikacji sposobu wytwarzania pożądaných struktur.

**Cel pracy.** Celem pracy było opracowanie nowej metody wyznaczania naprężeń w warstwach epitaksjalnych na podstawie rozkładu dystorsji sieci otrzymanych z komputerowej analizy zdjęć mikroskopowych. Dystorsje te otrzymano przy użyciu metody fazy geometrycznej. Wykorzystanie dystorsji sieci jako pola źródłowego do wyznaczania naprężeń residualnych dało możliwość bezpośredniego wyznaczenia naprężeń w próbkach widocznych na obrazach mikroskopowych z Rys. 3.1 i 3.2.

**Zakres pracy.** Przedstawiona dalej metoda wyznaczania naprężeń składa się z następujących etapów:

1. Wstępne wyznaczenie pola dystorsji sieci za pomocą metody fazy geometrycznej. Dystorsje wyznaczone są na podstawie obrazu z wysokorozdzielczego mikroskopu elektronowego (w odniesieniu do rozmiaru sieci jednego ze składników chemicznych heterostruktury).
2. Przygotowanie danych wejściowych do programu metody elementów skończonych. Etap ten zawiera: dyskretyzację przestrzenną obszaru, w którym są wyznaczone naprężenia, uśrednienie pola dystorsji adekwatnie do dyskretyzacji oraz, ewentualne, transformacje dystorsji sieci w zależności od potrzeb analizy, np. dla dostosowania do wybranej konfiguracji odniesienia.
3. Wyznaczenie pola dystorsji sprężystych sieci na podstawie wstępnie wyznaczonego pola dystorsji sieci oraz rozkładu przestrzennego poszczególnych składników chemicznych struktury. Wyznaczone pole dystorsji nie zawiera już składowej wynikającej z różnicy w rozmiarach stałych sieciowych składników heterostruktury (składowa ta jest zawarta w dystorsjach sieci wyznaczonych w pierwszym etapie).
4. Wyznaczenie pola naprężeń w strukturze przy wykorzystaniu nieliniowej teorii sprężystości, teorii dyslokacji oraz metody elementów skończonych.

W ramach niniejszej pracy opracowano trzy ostatnie etapy metody. Do rozwiązania problemu brzegowego zastosowano metodę elementów skończonych z wykorzystaniem nowych, oryginalnych algorytmów. Zaprezentowana metoda uwzględnia w swym sformułowaniu zarówno nieliniowości geometryczne, jak i fizyczne – uwzględniono m. in. stałe sztywności trzeciego rzędu. Zakres pracy ograniczono do pól mechanicznych, a więc pominięto efekty termomechaniczne, elektryczne czy piezoelektryczne. Pozwala to na lepszą interpretację wyników.

**Zawartość pracy.** Praca składa się z pięciu rozdziałów.

W rozdziale pierwszym dokonano krótkiego przedstawienia roli, jaką odgrywają naprężenia w warstwach epitaksjalnych.

Rozdział drugi prezentuje krótki przegląd metod wyznaczania naprężeń w heterostrukturach. Omówiono je z podziałem na metody eksperymentalne, analityczne oraz numeryczne. Zarys ten nie stanowi pełnego przedstawienia stanu wiedzy, ale ma pomóc w określeniu miejsca omówionej w pracy metody wyznaczania naprężeń. Spośród metod analitycznych przypomniane zostały dwa klasyczne modele tj. model Volterry oraz

model Frenkla-Kontorovej, a także modyfikacja modelu Frenkla-Kontorovej dokonana przez Foremana, Jaswona i Wooda. Rozwiązanie zastosowane w tym ostatnim modelu można bezpośrednio odnieść do zastosowanej w niniejszej pracy metody osłabiania sztywności materiału w obszarach rdzeni dyslokacji. Pokazano również jedną z metod wyznaczania energii zgromadzonej w warstwach epitaksjalnych, z uwzględnieniem energii wprowadzonej przez dyslokacje niedopasowania. Ten ostatni przykład ma pokazać uproszczenia, jakie są przyjmowane w wielu modelach analitycznych, używanych do modelowania heterostruktur. Odniesiono się również do stosowanych obecnie metod numerycznych.

Rozdział trzeci przedstawia metodę fazy geometrycznej, za pomocą której wyznaczono dystorsje sieci kryształów, a także opis warunków, w jakich uzyskano struktury CdTe/ZnTe/GaAs oraz GaN.

W rozdziale czwartym zaprezentowano proponowaną metodę wyznaczania naprężeń. Deformację ośrodka opisano poprzez mechanikę skończonych deformacji z uwzględnieniem metody pomiaru dystorsji sieci, tj. uwzględniono fakt, że dystorsje sieci wyznaczone są w odniesieniu do jednego z kryształów heterostruktury. Wyprowadzono zależności pomiędzy tensorem dystorsji sieci a wektorem przemieszczenia, zarówno w konfiguracji aktualnej, jak i w konfiguracji odciążonej. Dla wprowadzonych do opisu konfiguracji podano miary zdefektowania sieci oraz zależności pomiędzy nimi. Uwzględniono również wpływ zdefektowania sieci kryształu na własności sprężyste ośrodka poprzez zmniejszenie sztywności materiału w obszarach rdzeni dyslokacji. Do określenia zasięgu obszaru osłabienia siły wiązań atomowych wprowadzono parametr szerokości rdzenia dyslokacji. Jak pokazano, może on zostać wyznaczony na podstawie obrazu mikroskopowego rdzeni dyslokacji lub poprzez analizę stanu naprężeń wokół dyslokacji. Przedstawiono także uzasadnienie przyjętych wartości współczynnika szerokości rdzenia dyslokacji. Przy wyznaczaniu naprężeń w strukturze CdTe/ZnTe/GaAs uwzględniono stałe sztywności trzeciego rzędu. Dla struktury GaN nie zostały one zastosowane ze względu na brak odpowiednich danych w dostępnej literaturze. Opisano implementację numeryczną prezentowanego sformułowania, podano układ równań metody elementów skończonych oraz opisano warunki brzegowe wraz z uzasadnieniem przyjęcia ich postaci. Przedyskutowano również otrzymane wyniki numeryczne. W podsumowaniu zawarto wnioski z przeprowadzonej w pracy analizy.

Praca ta powstała w ramach i dzięki projektowi finansowanemu przez Komitet Badań Naukowych o numerze 7T07A 004 16, pod tytułem „Wykorzystanie tensorowych miar defektów struktury do analizy samonaprężeń i dystorsji sieci w warstwach epitaksjalnych”, kierowanemu przez promotora niniejszej pracy dr hab. Pawła Dłużewskiego.

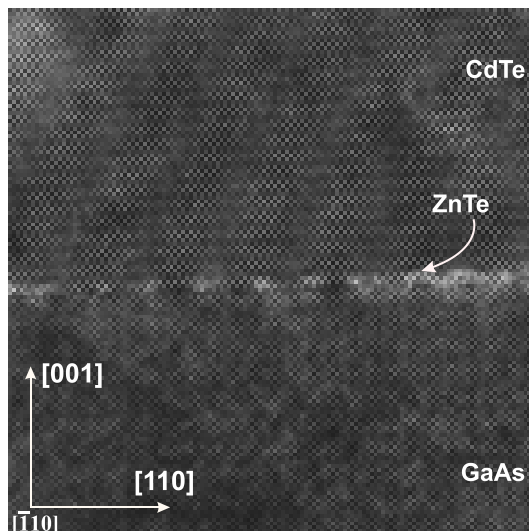
Wyniki uzyskane w pracy przedstawiono m. in. w pracach Dłużewski i in. (2001); Ruterana i in. (2002) oraz Kret i in. (2002).



# Rozdział 1

## Wprowadzenie

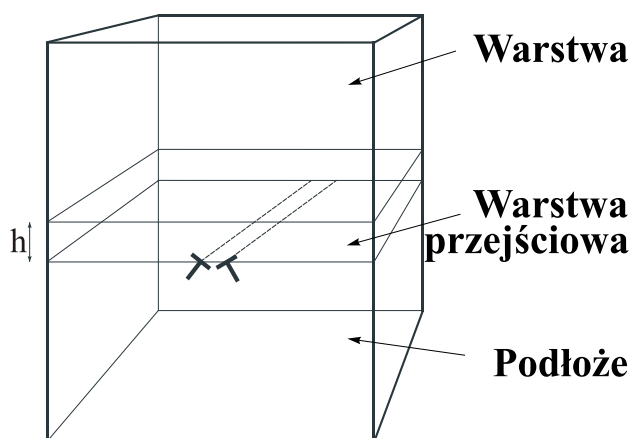
Przemysłowe wytwarzanie kryształów rozpoczęto na początku XX wieku we Francji. W początkowym okresie wykorzystywano je przede wszystkim do produkcji zegarków. Za pioniera wytwarzania kryształów można uznać Verneuil, którego metodę modyfikowali w następnych latach: Temman (1914), Czochralski (1918), Bridgmann (1923), Stöber (1925), Ramsberger i Malvin (1927) oraz Stochbarger (1936). Metoda Czochralskiego okazała się najbardziej przydatna. Wynalezienie tranzystora, a następnie rozwój technologii maszyn cyfrowych w technice wojskowej i później w cywilnej, spowodował ogromny wzrost zapotrzebowania na półprzewodniki, a tym samym na heterostruktury krystaliczne. Półprzewodniki, ze względu na swe specyficzne własności elektryczne, dobrze nadają się m. in. do budowy zintegrowanych układów elektronicznych, czy diod elektroluminescencyjnych. Najczęściej otrzymuje się je poprzez nanoszenie (wzrost) jednego kryształu, zwanego warstwą lub filmem, na innym, zwanym podłożem (Herman, 1987). Proces wzrostu jednego kryształu z substancji w stanie gazowym na innym, w skutek czego orientacja krystalograficzna warstwy zostaje narzucona przez orientację kryształu podłoża, nazywany jest epitaksją (Royer, 1928). Wzrost epitaksjalny kryształu na takim samym podłożu określany jest jako homoepitaksja, a na innym, jako heteroepitaksja. Proces wzrostu z reguły odbywa się w wysokich temperaturach (przeważnie 500 – 700 °C), zob. Joyce i in. (1988). Najczęściej stosowanymi metodami wzrostu kryształów są: epitaksja z wiązek molekularnych MBE, niskotemperaturowe chemiczne osadzanie CVD oraz metalo-ograniczone chemiczne osadzanie MOCVD (według pracy Scheel, 2000). Oprócz zastosowań w produkcji materiałów półprzewodnikowych, metoda łączenia dwóch kryształów poprzez nanoszenie może być m. in. zastosowana do osadzenia miedzi na chlorku sodu, przy różnicy stałych sieciowych wynoszącej 36% oraz srebra na miedzi, przy różnicy stałych sieciowych wynoszącej aż 44% (Pashley, 1956). Poza właściwościami elektronicznymi, istotną rolę w zastosowaniach półprzewodników odgrywają także właściwości mechaniczne materiału. Wynika to stąd, że mechaniczna



Rysunek 1.1: Obraz struktury CdTe/ZnTe/GaAs – jednej z analizowanych w pracy.

obróbka związana z produkcją i eksploatacją przyrządów półprzewodnikowych bardzo istotnie wpływa na ich własności eksploatacyjne. Może więc dojść do sytuacji, w której materiał o potencjalnie znakomitych parametrach eksploatacyjnych, czyli o właściwej przerwie energetycznej, odpowiednim kolorze luminescencji, nie spełnia „mechanicznych” kryteriów przydatności. Przyczyną tego może być zbyt duża ilość defektów powstałych podczas jego wytwarzania. Stan naprężeń wywołany przez defekty może również skutkować obniżeniem własności eksploatacyjnych – skróceniem czasu życia urządzeń, ograniczeniem możliwości ich zastosowań, a także zwiększeniem kosztów wytwarzania (Mahajan, 2000). Ocenia się, że ze względu na koszty wytwarzania, najczęściej stosowane w technologii półprzewodników są krysztaly krzemu, arsenku galu oraz fosforu indu, na które przypada około 60% całej produkcji (zob. Scheel, 2000).

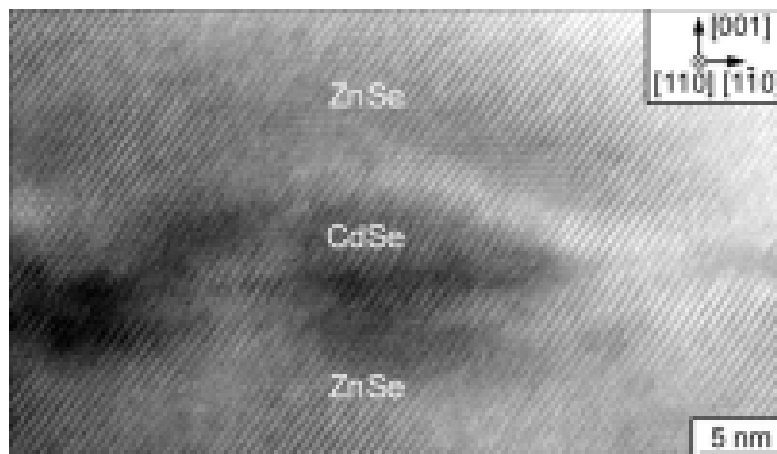
Temperatura jest jednym z podstawowych czynników wpływających na proces wzrostu krysztalów, a stąd także na końcowy stan naprężeń w strukturze. Poziom temperatury podczas wzrostu i w czasie użytkowania urządzenia są na ogół różne, a ponieważ współczynniki rozszerzalności termicznej poszczególnych materiałów składowych często znacznie się różnią, naprężenia residualne rzędu 0.5 GPa, jak podaje Nix (1989), nie są rzadkością. W literaturze przyjęto zasadę (zob. np. Nix, 1989; Michler i in., 1999), że naprężenia w strukturze dzieli się na dwie grupy: naprężenia termiczne oraz naprężenia wewnętrzne (ang. intrinsic stresses). Te ostatnie spowodowane są innymi niż temperatura czynnikami, związanymi z procesem wytwarzania struktury. Uznaje się także, że poziom i rozkład naprężeń w danej próbce ma ogromny wpływ na takie



Rysunek 1.2: Schemat dyslokacji niedopasowania w warstwie epitaksjalnej.

własności jak: poziomy przerwy energetycznych, efektywne masy elektronów, ruchliwość elektronów itp. (por. Jain i Hayes, 1991; Schäffler, 1997). Dlatego też dla zapewnienia przydatności danego materiału w mikroelektronice duże znaczenie ma oszacowanie poziomu naprężeń i wpływu naprężeń na własności eksploatacyjne (Jain i in., 1996). Na przykład czas działania diody elektroluminescencyjnej opartej na arsenku galu i poddanej obciążeniom ściskającym może ulec skróceniu nawet dziesięciokrotnie (zob. Brantley i Harrison, 1973; Brantley i in., 1975). Dodatkowo, stan naprężeń w strukturze może być przyczyną powstawania w niej defektów np. dyslokacji (Jain i in., 1996). Te z kolei wpływają, najczęściej niekorzystnie, na właściwości elektroniczne struktur półprzewodnikowych. Typowy przykład obrazujący wpływ obecności dyslokacji na charakterystykę napięcie-naprężenie został przedstawiony w pracy Mahajana (Rys. 13, s. 148; Mahajan, 2000). Zróżnicowanie obszarów zastosowań półprzewodników wywołuje zapotrzebowanie na heterostruktury o specyficznych właściwościach elektronicznych, optycznych, jak i mechanicznych. Stąd, konieczne jest udoskonalanie heterostruktur krystalicznych stosownie do tych wymagań. Do wytworzenia produktów o pożądanych cechach końcowych niezbędne jest poznanie stanu odkształceń i naprężeń w tego typu strukturach, wraz ze zrozumieniem mechanizmów powstawania w nich defektów.

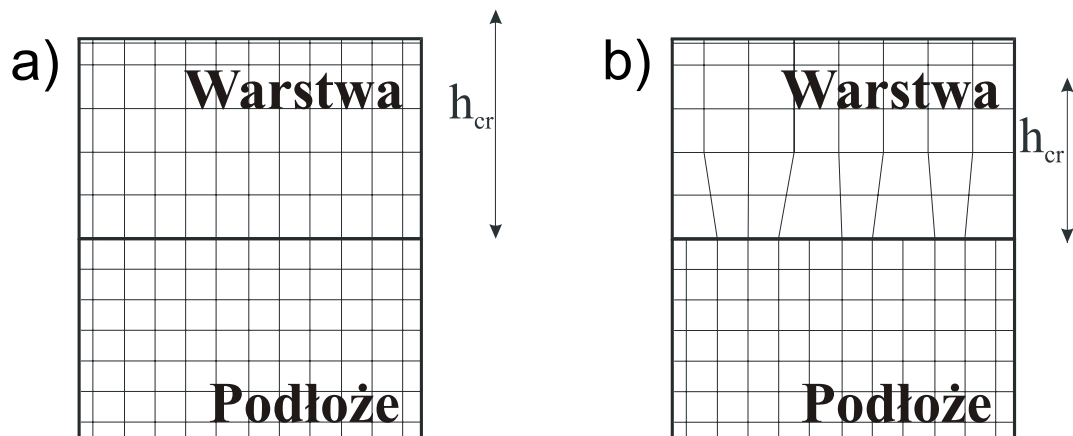
Znaczące zwiększenie zapotrzebowania przemysłu na materiały półprzewodnikowe pośrednio spowodowało dużą specjalizację środowiska naukowego. W zjawisku tym bywa upatrywany brak usystematyzowanej wiedzy co do źródeł wielu procesów i sposobów zapobiegania niektórym z nich, a także brak danych i metod eksperymentalnych do wyznaczania charakterystyk mechanicznych materiałów. Stąd też, w chwili obecnej zdecydowaną większość publikowanych prac stanowią próby opisu zachowania pojedynczych materiałów, a nie próby zrozumienia przyczyn procesów, czy poszczegól-



Rysunek 1.3: Przykład kropki kwantowej zaczerpnięty, za zgodą autora, z pracy Scheerschmidt i in. (2000).

nych cech materiałów (por. uwagi w pracy Scheel, 2000). Można powiedzieć, że obecnie gromadzone są dane, a czas ich usystematyzowania mamy przed sobą. Na podstawie dostępnych prac z tego obszaru wiedzy uważam, że zagadnienia naprężeń w heterostrukturach dopiero niedawno zaczęto postrzegać jako możliwe do ścisłego opisu. Podobnie jak w każdej innej dziedzinie, każdy wynik ma swą wartość ekonomiczną i wiele prac, w celu uzyskania przewagi technologicznej, w ogóle nie jest publikowanych. Zmniejszenie wymiarów produkowanych elementów powoduje jednocześnie, że niewiele jest obecnie modeli mechanicznych, adekwatnie opisujących procesy w tej skali. Istnieje więc duże zapotrzebowanie na nowe, bardziej użyteczne metody wyznaczania naprężeń w warstwach epitaksjalnych, co zostało *explicite* wyrażone w pracy Jain i in. (1996).

Próbie choć częściowego zaspokojenia tej potrzeby stanowi niniejsza praca. Zawiera ona propozycję metody wyznaczania odkształceń, naprężeń oraz orientacji sieci krystalograficznej w warstwach epitaksjalnych na podstawie danych uzyskanych za pomocą wysokorozdzielczej mikroskopii elektronowej. Do uzyskania rozkładu przestrzennego powyższych wielkości z uwzględnieniem obecności dyslokacji wykorzystano kontynuálną teorię dyslokacji (Kröner, 1981; De Witt, 1981; Dłużewski, 1996) oraz metodę elementów skończonych (Kleiber, 1985; Crisfield, 1997; Belytschko i in., 2000; Zienkiewicz i Taylor, 2000). Całość metody zobrazowano na przykładzie heterostruktury CdTe/ZnTe/-GaAs oraz struktury powstałej podczas wzrostu krysztalu GaN. W obu przypadkach wyznaczono rozkłady odkształceń, naprężeń i gęstości dyslokacji, a dla struktury z azotku galu również orientację sieci krystalograficznej. Schemat typowej struktury epitaksjalnej przedstawiono na Rys. 1.2. Na płaszczyźnie połączenia krysztalów zaznaczono



Rysunek 1.4: Schemat warstwy epitaksjalnej przy wysokości warstwy:

a)  $h < h_{cr}$ ; b)  $h \geq h_{cr}$ .

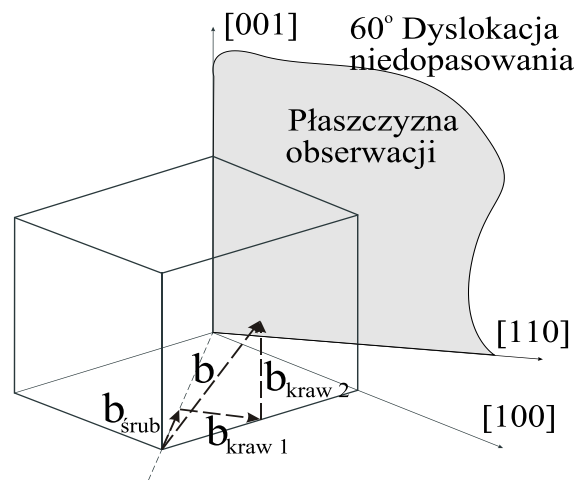
dwie, często występujące, dyslokacje  $60^\circ$ . Odnosząc ten schemat do jednej ze struktur, dla której wyznaczono w pracy wielkości poszukiwane (zob. Rys. 1.1), podłożem jest GaAs o stałej sieci 0.565325 nm, a warstwą – cienka warstwa buforowa ZnTe o grubości dwóch monowarstw i stałej sieci 0.61037 nm wraz z CdTe o stałej sieci 0.6477 nm. Warstwa buforowa stosowana jest w przypadku dużej różnicy stałych sieciowych podłoża i warstwy (zob. np. Sharma i in., 2000). Praktyka pokazała, że przy 14% niedopasowaniu rozmiarów sieci kryształów podłoża i warstwy, bardzo trudno połączyć oba składniki. By to osiągnąć stosowana bywa warstwa buforowa o stałej sieci, której wartość mieści się pomiędzy stałymi podłoża i warstwy właściwej. Jak sama nazwa wskazuje, pełni ona rolę bufora zwiększając długość odcinka, na którym następuje zmiana rozmiaru sieci. Mimo zastosowania warstwy buforowej, na połączeniu kryształów powstają dyslokacje kompensujące niedopasowanie sieci krystalicznej podłoża i warstwy.

Proponowana metoda może mieć zastosowanie do innych struktur występujących w mikroelektronice np. supersieci, czyli układów wielu warstw kryształów nakładanych naprzemiennie, w taki sposób by nie powstawały dyslokacje niedopasowania (zob. np. Ruterana i in. (2002)), czy do tzw. kropek kwantowych, której przykład przedstawiono na Rys. 1.3. Nadmienić jednak należy, że skomplikowana obróbka próbki, która jest niezbędna do wyznaczenia pola dystorsji sieci, ogranicza pole potencjalnych zastosowań metody.

## 1.1 Źródła naprężeń w warstwach epitaksjalnych

### 1.1.1 Niedopasowanie sieciowe

Wytworzeniu heterostruktury za pomocą epitaksji sprzyja mała różnica wymiarów sieci warstwy i podłoża. Im większa jest ta różnica, tym więcej defektów może powstać na połączeniu. Uzyskanie jak najmniejszej ilości defektów na połączeniu kryształów jest jednym z głównych czynników branych pod uwagę przy tworzeniu połączenia. Zazwyczaj proces wzrostu jednego kryształu (warstwy) na drugim (podłożu) rozpoczyna się od tetragonalnej deformacji sieci warstwy, dzięki czemu sieć warstwy dopasowuje się sprężysto do sieci podłoża, zob. Rys. 1.4a. Fazę tą nazwano wzrostem pseudomorficznym. Warstwa rosnąc odkształca się i tym samym gromadzi energię sprężystą odkształcenia sieci, aż do osiągnięcia poziomu energii niezbędnej do nukleacji dyslokacji. Energia sprężysta zostaje uwolniona, a w obszarze połączenia kryształów pojawiają się dyslokacje, jak przedstawiono na Rys. 1.4b. Grubość warstwy, przy której spontanicznie powstają dyslokacje określa się jako grubość krytyczną  $h_{cr}$ . Grubość krytyczna jest jednym z głównych czynników, na podstawie których jest planowany proces technologiczny. Odgrywa więc ona bardzo ważną rolę w technologii łączenia kryształów. W literaturze istnieje szereg propozycji, w jaki sposób wyznaczyć grubość krytyczną (np. People i Bean, 1985; Jesser i Van der Merwe, 1989). Różnice w uzyskiwanych wynikach są jednak duże (zestawienie w pracy Pinardi i in., 1998). Na poprawność jej wyznaczania wpływają przyjęte założenia. Jak dotąd brak ogólnego opisu, skutecznego w szerokim zakresie metod wzrostu kryształów (por. szczegółowe uwagi w pracach Hu, 1991a; Jain i in., 1996; Pinardi i in., 1998). Mimo eksperymentalnego potwierdzenia przydatności konkretnego wzoru w jednym przypadku, w innym różnica pomiędzy rzeczywistym zachowaniem się struktury, a wartością obliczoną okazuje się być nawet dziesięciokrotna. Przykładowo, dla ZnSe/GaAs grubość krytyczna na podstawie teorii rozwijanej przez Matthews i Blakeslee powinna wynosić 21 nm, natomiast wartość obserwowana wynosi 150 nm (Yao i in., 1987; Petruzzello i in., 1988). Brak jest obecnie dobrego modelu opisującego zjawisko powstawania dyslokacji w całej gamie obserwowanych procesów, jakkolwiek dostępne są próby wyznaczenia grubości krytycznej dosyć dobrze sprawdzające się w pewnych obszarach epitaksji (jak np. propozycja przedstawiona w pracy People i Bean, 1985). Wzór podany przez People i Bean, patrz (2.45), daje wartości około dziesięciokrotnie większe od tych wyznaczanych na podstawie wzoru Matthews i Blakeslee, zob. (2.44). Jak jednak wykazał Hu (1991a), sformułowanie People i Beana zawiera trudne do przyjęcia koncepcje gęstości energii powierzchniowej. Energię dyslokacji przelicza się na jednostkę długości linii dyslokacji, natomiast People i Bean przyjęli,



Rysunek 1.5: Składowe wektora Burgersa dyslokacji  $60^\circ$ .

że pojedynczej dyslokacji można przypisać pewną powierzchnię płaszczyzny połączenia kryształów. Powierzchnia ta została przez nich wybrana bez uzasadnienia. Model ten był jednak szeroko stosowany gdyż, mimo swoich wad, dawał najlepszą zgodność z wynikami eksperymentalnymi. Niezgodność innych modeli, zob. np. wzór (2.44), przypisywana jest m. in. pominięciu struktury atomowej powierzchni łączonych kryształów (zob. uwagi w pracach Meyer i in., 1995; Brune i Kern, 1997), czy nieuwzględnieniu wyspowego sposobu wzrostu warstwy. Tak podstawowy parametr jak grubość krytyczna nie doczekał się więc, jak dotąd, ogólnego opisu analitycznego zgodnego z wynikami eksperymentalnymi (szczegółową dyskusję przedstawiono m. in. w pracach Jain i in., 1996; Pinardi i in., 1998).

Często istnieje potrzeba łączenia kryształów o dużym niedopasowaniu sieciowym. W celu uzyskania produktu o dobrej jakości stosuje się wtedy metody obniżające poziom zdefektowania połączenia. W niektórych przypadkach ich zastosowanie jest niezbędne do połączenia dwóch kryształów. Oto niektóre z tych metod:

- **Warstwa pośrednia-buforowa.** W metodzie tej rozmiar sieci warstwy buforowej mieści się pomiędzy rozmiarem sieci podłoża oraz warstwy. Warstwa buforowa ma za zadanie częściowe skompensowanie niedopasowania sieciowego, co umożliwia połączenie kryształów. Metodę tą zastosowano w przypadku struktury CdTe/ZnTe/GaAs, na której w dalszej części pracy zilustrowano zaproponowaną metodę wyznaczania naprężeń.
- **Lateralny wzrost epitaksjalny.** Metoda ta polega na osadzaniu na podłożu cienkiej warstwy np. tlenku krzemu. W niej wytwarza się okresowe przerwy (za pomocą

fotolitografii), a dopiero potem osadzana jest właściwa warstwa. Skutkiem tych działań jest znaczne ograniczenie możliwości propagacji dyslokacji z podłoża do warstwy, ponieważ jedyną możliwością przedostania się dyslokacji do warstwy jest ich przejście przez wąskie przerwy.

- **Cienkie podłoże.** Zwykle podłoże jest znacznie grubsze niż warstwa. W tej metodzie jest ono jednak stosunkowo cienkie. Dzięki temu deformacja w znacznym stopniu jest przejmowana przez podłoże. Po zakończeniu wzrostu podłoże jest osadzane na innym, grubszym materiale (np. Teng i Lo, 1993).

Liniowa teoria sprężystości wykorzystywana jest w zdecydowanej większości prac z zakresu zagadnień naprężeń w warstwach epitaksjalnych. Średnie odkształcenie w warstwie określa się wzorem

$$f_m = \frac{a_{\text{warstwy}} - a_{\text{podłoża}}}{a_{\text{podłoża}}}, \quad (1.1)$$

gdzie jako  $a_{\text{warstwy}}$  oraz  $a_{\text{podłoża}}$  oznaczono odpowiednio wymiar stałej sieciowej kryształu warstwy i kryształu podłoża. W przypadku izotropii, naprężenie wynikające z niedopasowania rozmiarów sieci kryształów wyznaczone jest z zależności:

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} = -2\mu \frac{1 + \nu}{1 - \nu} f_m, \quad (1.2)$$

gdzie  $\mu$  oraz  $\nu$  oznaczają stałą Lamego i współczynnik Poissona. Ze względu na stosowanie liniowej teorii sprężystości naprężenia wywoływane przez różne źródła, również przez defekty, są sumowane.

### 1.1.2 Naprężenia termiczne

Jak już wspomniano, jednym z podstawowych źródeł naprężeń w warstwach epitaksjalnych są czynniki termiczne. Ponieważ wzrost struktury następuje z substancji w stanie gazowym, warstwy epitaksjalne wytwarzane są w podwyższonych temperaturach. Pojawia się w związku z tym szereg problemów. W przypadku wytwarzania heterostruktury z kryształów o mało różniących się stałych sieciowych trudno jest uniknąć powstania defektów, jeśli wartości współczynników rozszerzalności cieplnej znacząco się różnią. Nawet gdy kryształy łączą się bez powstawania dyslokacji, to zmiana temperatury podczas schładzania powoduje, że odkształcają się. Najczęściej następuje wtedy nukleacja defektów.

Współczynniki rozszerzalności cieplnej kryształów wybranych do połączenia są bardzo istotne. Jedną z metod stosowanych w epitaksji jest takie dobranie kryształów, by



w temperaturze wzrostu ich rozszerzalność cieplna ograniczyła, lub nawet całkowicie zniwelowała różnice w rozmiarach ich sieci. Jest to możliwe dzięki temu, że roztwory związków półprzewodnikowych potrójnych z grup III-V i II-VI zmieniają stałą sieciową w sposób liniowy, w zależności od stężenia chemicznego – co w przybliżeniu opisuje prawo Vegarda (Ball i Van Der Merwe, 1983; Jain i in., 1996). Przykładowo, dla związku  $\text{In}_X\text{Ga}_{1-X}\text{As}$ , stała sieciowa uzależniona od zawartości indu może być opisana wzorem  $a(X) = a_{\text{InAs}} * X + a_{\text{GaAs}} * (1-X)$ . W obecnych zastosowaniach przybliżenie takie uznawane jest za dostatecznie dokładne (Jain i in., 1996). W podobny sposób, choć nie zawsze przy użyciu zależności liniowej, można wyznaczyć zależność przerwy energetycznej od stężenia chemicznego składników (zob. np. Tu i in., 1992). Jednak nawet dobranie składu chemicznego niwelującego różnicę stałych sieciowych w temperaturze wzrostu nie zapewni wyeliminowania dyslokacji w produkcie końcowym. Po fazie wzrostu próbkę trzeba schłodzić do temperatury pokojowej, co doprowadzi do naprężeń wewnętrznych. Ich częściowe uwolnienie poprzez powstanie dyslokacji niedopasowania zwykle jest korzystne energetycznie. Jeśli w temperaturze wzrostu w heterostrukturze miała miejsce całkowita relaksacja naprężeń, to po schłodzeniu odkształcenie niedopasowania można wyznaczyć ze wzoru

$$f_{m,T} = (\alpha_{T,\text{warstwy}} - \alpha_{T,\text{podłoża}})(T - T_0), \quad (1.3)$$

gdzie  $\alpha_{T,\text{warstwy}}$  i  $\alpha_{T,\text{podłoża}}$  oznaczają współczynniki rozszerzalności cieplnej warstwy i podłoża. W powyższej zależności pominięto zmienność poszczególnych współczynników rozszerzalności cieplnej wraz ze zmianą temperatury oraz możliwość powstania odkształceń plastycznych. Temperatura w czasie procesu użytkowania może się zmieniać, a przez to dodatkowo komplikować wyznaczenie naprężeń wewnętrznych. Kolejnym czynnikiem wpływającym na rozkład naprężeń jest niejednorodność rozkładu temperatury. Gradienty temperatury wywoływane są m. in. przez skomplikowaną geometrię powierzchni połączeń (zob. przegląd w pracy Hu, 1991b). Gradienty te wpływają także na dyfuzję poszczególnych składników, a mogą również wywołać naprężenia zdolne spowodować płynięcie plastyczne. Temperatura jest więc bardzo istotnym źródłem naprężeń w warstwach epitaksjalnych. W niniejszej pracy rozpatrywano jednak przypadek izotermiczny, stąd czynnik ten pominięto.

### 1.1.3 Wpływ stanu naprężeń na własności eksploatacyjne

Konieczność wytwarzania coraz trwalszych produktów półprzewodnikowych wymusza uwzględnienie wpływu czasu na ich własności użytkowe (Mahajan, 2000). Wpływ zewnętrznych czynników mechanicznych na urządzenia jest skutecznie eliminowany

przez odpowiednie obudowy, ale trwałość struktury może zostać zaburzona przez efekty starzenia oraz przez działające na strukturę pola termiczne. Te ostatnie sprzyjają dyfuzji, która przyczynia się do skrócenia czasu eksploatacji urządzeń. Spowodowało to podjęcie bardziej systematycznych badań teoretycznych i eksperymentalnych nad mechanizmami dyfuzji i jej ilościowym opisem (np. Clark i in., 1995; Tsong i Chen, 1997). Stan naprężeń wpływa bezpośrednio na właściwości elektroniczne i optyczne poprzez modyfikację pasm przewodnictwa (Jain i in., 1997a; Nag, 2000), co może to być wykorzystane do modyfikacji pasm przewodnictwa, pod warunkiem jednak, że możliwe jest kontrolowanie stanu naprężeń. Badanie pasm przewodnictwa może też służyć do wyznaczania stanu naprężeń. Tak więc kolor świecenia diody może wskazywać na poziom naprężeń w warstwie epitaksjalnej. Ciekawą ideą wykorzystania dyslokacji jest zastosowanie ich jako tranzystorów (zob. Scheel, 2000). Jak dotąd niestety nie rozwiązano problemu kontroli powstawania dyslokacji.

Podsumowując, wyznaczanie stanu naprężeń na poszczególnych etapach wytwarzania heterostruktur krystalicznych potrzebne jest zarówno do poprawy procesów technologicznych, jak i do oceny przydatności produktów do ich użytkowania.

## Rozdział 2

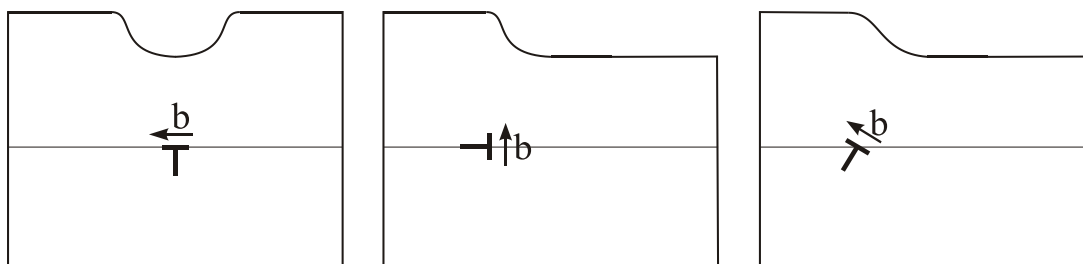
# Wyznaczanie naprężeń w heterostrukturach

### 2.1 Metody eksperymentalne

Potrzeba wyznaczania naprężeń (odkształceń) w strukturach epitaksjalnych wymusiła opracowanie nowych metod pomiarowych. Obecnie odkształcenia najczęściej wyznaczone są bezpośrednio na podstawie odległości międzyatomowych lub na podstawie wielkości związanych z uśrednionymi odkształceniami na pewnym obszarze, np. po grubości warstwy (Freund, 1996). Dla nakreślenia obecnych możliwości eksperymentalnego pomiaru odkształceń poniżej skrótowo je omówiono.

#### 2.1.1 Pomiary na podstawie zakrzywienia podłoża

Spośród metod wyznaczenia promienia zakrzywienia podłoża warto wymienić: skanowanie laserowe, dyfrakcję promieni Roentgena i interferencję optyczną. Grubość warstwy w heterostrukturze epitaksjalnej jest zwykle niewielka w porównaniu z grubością podłoża. Z tego powodu, często przyjmowane jest założenie o jednorodności odkształceń na przekroju grubości filmu (zob. Nix, 1989). Wyznaczając naprężenia na podstawie zakrzywienia podłoża najczęściej przyjmuje się, że grubość warstwy jest równomierna na całej powierzchni, a zakrzywienie górnej powierzchni podłoża odpowiada zakrzywieniu warstwy na całej jej grubości – jest uśrednieniem krzywizny po grubości warstwy (przegląd często przyjmowanych założeń przedstawiono m. in. w pracy Nix, 1989). Na ogół zakłada się także, że materiał jest izotropowo sprężysty. Tak daleko posunięte założenia mogą w istotny sposób zniekształcać obraz rzeczywistego zakrzywienia i, tym samym, obraz stanu naprężeń. Jak zwrócił uwagę Flinn (1989), zbyt często pomijana jest anizotropia własności sprężystych materiałów. Należy jednak zaznaczyć, że w większości eksperymentów orientacja krystalograficzna dobierana jest w



Rysunek 2.1: Wpływ dyslokacji na zakrzywienie powierzchni swobodnej; obserwacje mikroskopowe przedstawiono w pracy Springholz i in. (1996).

taki sposób, by wystarczająca była tylko jedna wartość zakrzywienia  $f$ . Spaepen (2000) wykazał, że na stan naprężeń wpływa także lokalny kształt powierzchni warstwy. Jeśli powierzchnia warstwy wykazuje lokalne zakrzywienia, to wartość naprężeń zostaje obniżona w stosunku do wartości średniej. Efekt taki może zostać również wywołany przez obecność dyslokacji w pobliżu granicy kryształów, zob. Rys. 2.1 (Springholz i in., 1996). W tej ostatniej pracy zaobserwowano go w przypadku powierzchni swobodnej, ale występuje też, choć w mniejszym stopniu, ze względu na mniejszą swobodę odkształcania materiału, również w przypadku powierzchni rozdzielającej dwa kryształy. Efekt zafalowania powierzchni wywołany przez dyslokacje może być spowodowany nie tylko efektem geometrycznym istnienia dodatkowej płaszczyzny krystalograficznej, ale także nieliniową charakterystyką naprężenie – odkształcenie (zob. Spaepen, 2000). Do niewątpliwych zalet metod wyznaczania naprężeń na podstawie zakrzywienia podłoża należy zaliczyć możliwość ich wyznaczania w czasie rzeczywistym i możliwość wyznaczania historii stanu naprężeń przez obserwację w czasie procesu wzrostu. Metoda skanowania powierzchni laserem pozwala mierzyć zakrzywienie o promieniu nawet 10 km, co odpowiada w przybliżeniu 0.2 MPa (Nix, 1989).

### 2.1.2 Metoda fotoluminescencji

Naprężenia (odkształcenia) powodują zmianę struktury pasmowej (Nag, 2000). Z badań eksperymentalnych (np. Kuphal i in., 1993) znane są zależności określające wpływ naprężeń na zmianę przerwy energetycznej. Zaobserwowano, że wpływ naprężeń hydrostatycznych i ścinających na przerwę energetyczną jest różny (zestawienie w pracy Jain i in., 1996). Opis uwzględniający wpływ naprężeń przeprowadzany jest więc z podziałem na te dwa mody stanu naprężeń (zob. również Nag, 2000).

Wraz ze zmianą składu chemicznego warstwy ulega zmianie szerokość przerwy energetycznej (obserwacje takie zawiera np. praca Ji i in., 1987). Zmiana taka nakłada się

na zmianę szerokości przerwy energetycznej spowodowaną naprężeniami (wywoływany również przez zmianę składu chemicznego). W szczególnym przypadku efekty te, nakładając się na siebie, mogą się niwelować. Przykładowo, dla  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$  zmiana koncentracji germanu nie wpływa na zmianę szerokości przerwy energetycznej. Wzrost stężenia germanu powoduje wzrost szerokości przerwy energetycznej, ale jednoczesny wzrost naprężeń rozciągających wywołuje efekt odwrotny (Bensaada i in., 1994).

Gdy w opisie uwzględnione zostaną dyslokacje i wprowadzane przez nie zmiany w stanie odkształceń (naprężeń), opis stanu naprężeń znacznie się skomplikuje. W takim przypadku naprężenia powinny być wyznaczane dla każdej z próbek, gdyż pomimo bardzo podobnych procedur wzrostu danego rodzaju warstwy uzyskiwane wyniki pomiarów często znacznie różnią się między sobą. Na przykład, dla heterostruktury GaAs/Si po wzroście w temperaturze pomiędzy  $600^\circ\text{C}$  a  $700^\circ\text{C}$ , odkształcenia w arsenku galu w temperaturze  $20^\circ\text{C}$  wg. Sugo i in. (1989) wynoszą  $1.3 \times 10^{-3}$ , a wg. Harissa i in. (1988)  $1.9 \times 10^{-3}$ . Może to być spowodowane wieloma czynnikami, np. różnicą w liczbie dyslokacji w heterostrukturze, a tym samym różnym stopniem relaksacji próbek. Przy użyciu tej metody można również wyznaczać stan naprężeń w warstwach epitaksjalnych (np. Asai i Oe, 1983; Bensaada i in., 1994).

Metoda fotoluminescencji dobrze sprawdza się w pomiarze odkształceń w heterostrukturach (za Jain i in., 1996). W przypadku obecności dyslokacji niedopasowania, ze względu na ograniczone możliwości rozdzielenia odkształceń tetragonalnych sieci od odkształceń wywoływanych przez dyslokacje, bardziej racjonalnym wydaje się jednak wykorzystanie innych metod, zob. uwagi w pracy Bensaada i in. (1994). Metoda fotoluminescencji uznawana jest za stosunkowo dokładną (Kuphal i in., 1993; Tabata i in., 1994; Jain i in., 1996). Dzięki niej wykazano m. in., że naprężenia w niektórych warstwach mogą osiągać wartości 4 GPa (Jain i in., 1996). Ten krótki opis potwierdza także, że odkształcenia (naprężenia) w heterostrukturach mają istotny wpływ na własności eksploatacyjne urządzeń.

### 2.1.3 Pomiary za pomocą promieni Roentgena

Odształcenia w warstwach epitaksjalnych mogą być wyznaczane za pomocą promieni Roentgena (Indenbom i Kaganer, 1990a,b), zob. również przegląd metod wyznaczania naprężeń w cienkich warstwach przedstawiony w pracy Nix (1989). Ze względu na dyfrakcyjny charakter tej metody, jej zastosowanie jest ograniczone do materiałów o strukturze periodycznej. Oprócz odległości międzypłaszczyznowych możliwe jest wyznaczenie zakrzywienia sieci kryształu. Przyjmuje się, że można ją stosować do warstw o grubości od kilku do kilkudziesięciu mikrometrów. Zastosowanie jej do materiałów

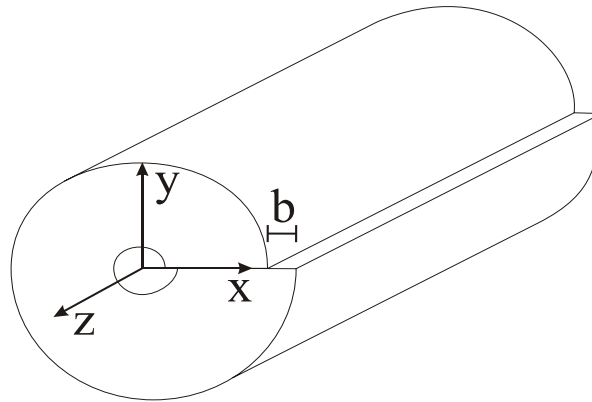
zawierających dyslokacje powoduje uśrednienie wartości dystorsji sieci po obszarze od kilku  $\mu\text{m}$  do kilkuset  $\mu\text{m}$  (Indenbom i Kaganer, 1990a). Wyznaczonemu rozkładowi dystorsji odpowiadać więc może wiele różnych układów dyslokacji, ale wszystkie one mają identyczne pola tzw. geometrycznie niezbędnych dyslokacji. Na przykład, układ dyslokacji w postaci dwu blisko siebie położonych dyslokacji o równoległych liniach dyslokacji, ale o przeciwnym zwrocie wektora Burgersa nie wykazuje dystorsji sieci i tym samym obecności dyslokacji, ponieważ dla każdego punktu pomiarowego całkowity wektor Burgersa równy jest zeru. Rozróżnienie pomiędzy tensorem gęstości dyslokacji i tensorem gęstości dyslokacji geometrycznie niezbędnych jest w tym przypadku szczególnie istotne. Przy użyciu tej metody, naprężenia wyznaczone są zwykle z wykorzystaniem prawa Hooke'a. Za pomocą promieni Roentgena można także wyznaczyć zakrzywienie warstwy łączącej kryształy, a następnie, ze wzoru Stoney'a (dyskusja w pracy Nix, 1989) wyznaczyć naprężenia (np. Tao i in., 1991). Mierzone wartości są uśrednione po grubości filmu.

## 2.2 Metody analityczne

### 2.2.1 Naprężenia wywoływane przez dyslokacje

W wielu przypadkach plastycznych deformacji materiałów konieczna jest znajomość naprężeń wywoływanych przez pojedynczą dyslokację. Do klasycznych modeli dyslokacji zaliczyć można modele Volterry oraz Peierlsa-Nabarro. Poniżej zostaną one pokrótce omówione. Poprzez porównanie zaproponowanej w dalszej części rozprawy metody wyznaczania naprężeń wokół dyslokacji z wyżej wymienionymi modelami dyslokacji, możliwa jest ocena zalet i wad proponowanej metody.

**Model Volterry.** Model Volterry wyznacza naprężenia w cylindrze z wydrążonym rdzeniem (Rys. 2.2) poddanemu wirtualnemu przecięciu, a następnie translacyjnemu przemieszczeniu jednej z części wzdłuż przecięcia. Dla dyslokacji śrubowej translacja następuje wzdłuż dyslokacji (osi  $z$  według oznaczeń z Rys. 2.2), podczas gdy dla dyslokacji krawędziowej wzdłuż osi  $x$ . W przypadku dyslokacji mieszanej translacja jest kombinacją obu wyżej wymienionych przesunięć. Ograniczając rozważania do modelu ośrodka izotropowego, dla dyslokacji śrubowej można przyjąć następującą postać przemieszczeń



Rysunek 2.2: Schemat dyslokacji krawędziowej Volterry.

$$u_x = u_y = 0, \quad (2.1)$$

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \theta = \frac{b}{2\pi} \arctan\left(\frac{y}{x}\right), \quad (2.2)$$

gdzie  $b$  oznacza długość wektora Burgersa, natomiast  $\theta \in [0, 2\pi)$  oznacza kąt wokół osi  $z$ . Stąd, niezerowe składowe tensora naprężeń otrzymuje się dla następujących składowych

$$\sigma_{xz} = -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}, \quad (2.3)$$

$$\sigma_{yz} = \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}. \quad (2.4)$$

W przypadku dyslokacji krawędziowej, wykorzystując funkcje naprężeń Airy'ego, otrzymuje się następujące wzory na składowe tensora naprężeń

$$\sigma_{xx} = -Dy \frac{3x^2 + y^2}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (2.5)$$

$$\sigma_{yy} = Dy \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (2.6)$$

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = Dx \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (2.7)$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = -2D\nu \frac{y}{x^2 + y^2}, \quad (2.8)$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = 0, \quad (2.9)$$

gdzie  $D = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}$ . W powyższych wzorach  $\mu$  i  $\nu$  oznaczają odpowiednio stałą Lamego oraz współczynnik Poissona. Przemieszczenia opisane są następującymi zależnościami:

$$u_x = \frac{b}{2\pi} \left[ \arctan\left(\frac{y}{x}\right) + \frac{xy}{2(1-\nu)(x^2+y^2)} \right], \quad (2.10)$$

$$u_y = -\frac{b}{2\pi} \left[ \frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \ln(x^2+y^2) + \frac{x^2-y^2}{4(1-\nu)(x^2+y^2)} \right]. \quad (2.11)$$

Pole naprężeń dla układu wielu dyslokacji można otrzymać sumując pola naprężeń pochodzące od poszczególnych dyslokacji (teoria liniowa). Jak wynika z powyższych zależności, pole naprężeń jest nieciągłe w punkcie lokalizacji linii dyslokacji

$$r = \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow 0. \quad (2.12)$$

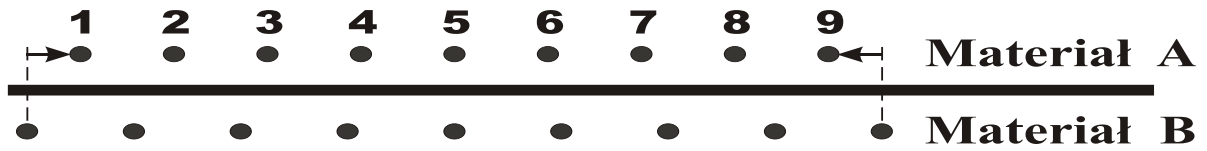
Mimo tej wady, model Volterry jest bardzo często stosowany ze względu na swą użyteczność i prostotę. Jako przykład jego zastosowania może służyć analiza stopnia relaksacji w warstwach epitaksjalnych przedstawiona w pracach Atkinson i Jain (1992, 1993). Przy zastosowaniu w opisie modelu Volterry uzyskiwane są naprężenia dalekiego zasięgu. W przypadku dyslokacji niedopasowania odległości pomiędzy dyslokacjami nie są znacząco większe od wymiarów rdzeni dyslokacji więc stosowanie modelu Volterry powinno być bardzo ostrożne (por. uwagi w pracy Bonnet i Loubradou, 1994).

**Model Frenkla-Kontorovej.** Model F-K należy do grupy modeli dyskretnych (lub półdyskretnych), tzn. takich, które określają dyslokacje poprzez dyskretny rozkład poszczególnych atomów (Frenkel i Kontorova, 1938). W modelu tym zakłada się, że w dwóch warstwach atomów położonych jedna nad drugą, pojedyncza dyslokacja powstaje jako wynik przesunięcia atomów z jednej warstwy względem tych z drugiej, zob. Rys. 2.3. Zakłada się ponadto, że atomy dolnej warstwy nie przemieszczają się, oraz, że obie warstwy atomów nie mogą doznawać przemieszczeń w kierunku pionowym. W takim przypadku atomy górnej warstwy są w konfiguracji o wyższej energii niż w przypadku pozostawiania w pozycjach nad środkami odległości pomiędzy atomami dolnej warstwy. Ta nadwyżka energetyczna związana jest z wprowadzoną dyslokacją. Na Rys. 2.3 przedstawiono schematycznie konfigurację atomów w tym modelu. Warunki brzegowe na przemieszczenia atomów mają następującą postać

$$\lim_{k \rightarrow -\infty} u_k = b, \quad (2.13)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} u_k = 0, \quad (2.14)$$





Rysunek 2.3: Schemat rozmieszczenia atomów w modelu Frenkla-Kontorovej.

gdzie  $k$  jest liczbą całkowitą i oznacza numery atomów. W modelu tym zakłada się także, że potencjał układu atomów opisuje funkcja periodyczna postaci

$$W(u_k) = A \left( 1 - \cos \frac{2\pi u_k}{b} \right), \quad (2.15)$$

przy czym  $A$  jest stałą materiałową, która zależy od sił oddziaływań międzyatomowych i wyznaczana jest ze stałych sztywności. Energia oddziaływań atomów górnej warstwy na atomy warstwy dolnej zależy więc wyłącznie od względnych przesunięć pomiędzy nimi. Energia związana z oddziaływaniem dwóch atomów równa jest iloczynowi kwadratu odległości pomiędzy nimi i współczynnika proporcjonalności  $\alpha$ , charakterystycznego dla danego materiału

$$w^{k,k+1} = \frac{1}{2} \alpha (u_k - u_{k+1})^2. \quad (2.16)$$

Suma oddziaływań atomów górnej warstwy pomiędzy sobą wraz z sumą oddziaływań z atomami dolnej warstwy daje energię całkowitą

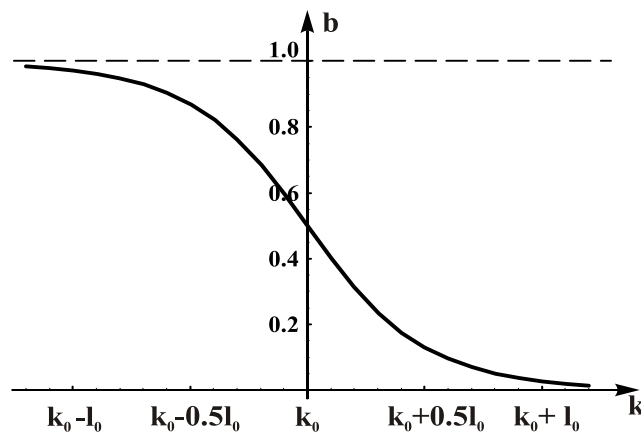
$$U = \sum_{k=-\infty}^{\infty} [W(u_k) + w^{k,k+1}]. \quad (2.17)$$

Minimalizując tę funkcję otrzymujemy zależność na przemieszczenia atomów

$$u = \frac{2b}{\pi} \arctan \left( \exp \frac{\pi(k_0 - k)}{l_0} \right), \quad (2.18)$$

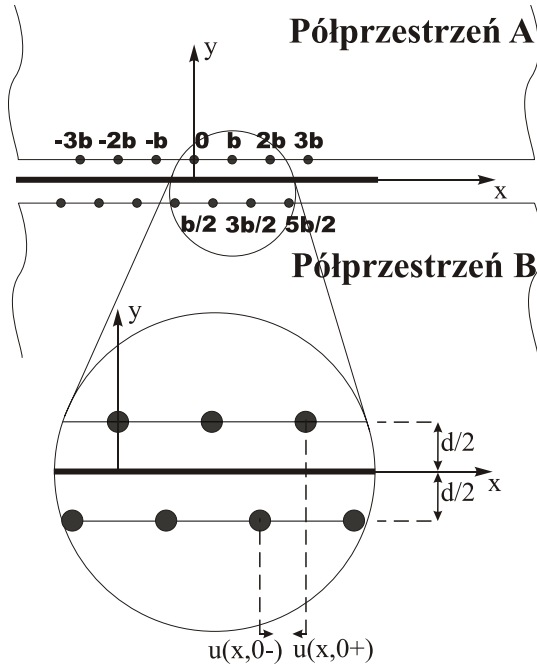
gdzie  $l_0 = (b/2)(\alpha/A)^2$ . Wartość  $l_0 * b$  przyjmuje się jako szerokość rdzenia dyslokacji. Na Rys. 2.4 przedstawiony jest wykres zależności (2.18) po interpolacji. W modelu tym otrzymuje się odkształcenia bez osobliwości w miejscu linii dyslokacji. Zawiera on jednak silne uproszczenia, a najistotniejszymi z nich wydają się być: brak możliwości przemieszczania atomów górnej warstwy w kierunku pionowym i brak możliwości przemieszczeń warstwy dolnej.

**Model Peierlsa-Nabarro.** Innym modelem dyskretnym dyslokacji jest model Peierlsa-Nabarro (Peierls, 1940; Nabarro, 1947). Analizowana grupa atomów, podobnie jak w modelu Frenkla-Kontorovej, składa się z dwóch rzędów atomów ułożonych jeden nad



Rysunek 2.4: Przemieszczenia atomów górnej warstwy w modelu Frenkla-Kontorovej po interpolacji.

drugim. Górny rząd atomów zawiera o jeden atom więcej niż dolny. Dodatkowo zakłada się, że po obu stronach płaszczyzny rozdzielającej materiały znajdują się półprzestrzenie sprężyste. Półpłaszczyzny te mogą doznawać odkształceń również w kierunku pionowym. Dla prostoty modelu przyjęto, że wszelkie niezerowe składowe przemieszczenia wynikają z interakcji atomów na granicy warstwy, czyli z niedopasowania pozycji atomów stykających się wzdłuż płaszczyzny połączenia. Zakłada się także, że przemieszczenia pionowe atomów w obu rzędach atomów są zanedbywalne. Powyższe założenia powodują, że jakkolwiek model ten nie jest bardziej skomplikowany od modelu Frenkla-Kontorovej, to pozwala on jednak na wykorzystanie znanych rozwiązań teorii sprężystości dla półprzestrzeni sprężystej. W modelu Peierlsa-Nabarro zakładana jest następująca konfiguracja: półprzestrzenie oddalone są od siebie o  $d$  i na płaszczyźnie zajmują miejsce opisane jako  $y > d/2$  oraz  $y < -d/2$ , zob. Rys. 2.5. Początkowo górna półprzestrzeń jest dłuższa o  $b$  od dolnej półprzestrzeni na pewnym, dostatecznie długim, odcinku  $L$  późniejszego połączenia. Przez określenie dostatecznie długo rozumiana jest długość znacznie większa od  $b$ . Można również przyjąć, że  $L \rightarrow \infty$ . Oba materiały łączy się poprzez ściśnięcie górnej warstwy, tak by osiągnęła ona wymiar równy wymiarowi dolnej półprzestrzeni. Symetria układu oraz warunki brzegowe powodują zgodność przemieszczeń na brzegach połączenia, więc dyslokacja jest zlokalizowana w środku układu współrzędnych. Oczywiście, jest to skutek idealizacji rzeczywistego zachowania materiału. W układzie rzeczywistym, przy powyższych warunkach brzegowych, nie można przewidzieć miejsca wystąpienia dyslokacji. Ze względu na symetrię zachodzi również zależność  $u_x(x, 0+) = -u_x(x, 0-)$ . Początkowe pozycje atomów górnej warstwy tj.  $b, 2b, 3b, \dots$ , zostaną zmienione o wartość przemieszczenia  $u(x)$ , natomiast



Rysunek 2.5: Schemat konfiguracji atomów w modelu Peierlsa-Nabarro.

pozycje atomów dolnej warstwy o wartość  $-u(x)$ . Zakłada się ponadto, że dla małych wartości przemieszczeń, postać funkcji naprężeń jest periodyczna:

$$\sigma_{xy} = -\frac{\mu}{2\pi} \sin \frac{4\pi u(x)}{b}, \quad (2.19)$$

gdzie  $u(x)$  jest przesunięciem atomów jednej warstwy względem atomów drugiej warstwy. Korzystając z funkcji naprężeń Airy'ego dla przypadku półprzestrzeni sprężystej

$$\Psi(x, y) = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} y \ln[(x-x')^2 + y^2] u'(x') dx' \quad (2.20)$$

oraz, dla znanej funkcji przemieszczeń  $u(x)$ , otrzymuje się naprężenia ścinające określone wzorem

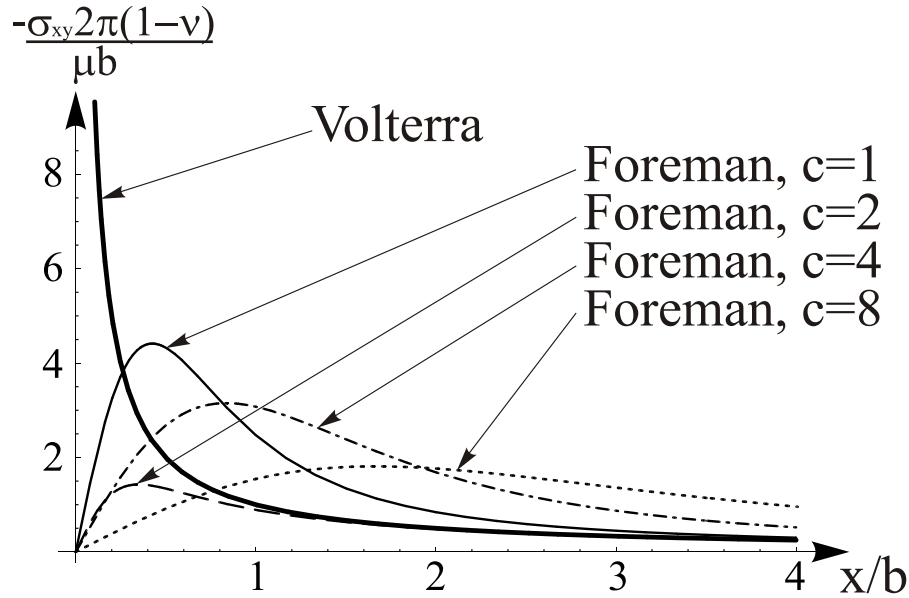
$$\sigma_{xy}(x, 0) = -\frac{\mu}{\pi(1-\nu)} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u'(x') dx'}{x-x'}. \quad (2.21)$$

Oznaczenie  $P$  określa wartość główną całki. Porównując obie postaci funkcji naprężeń (2.19) oraz (2.21), otrzymuje się

$$-\frac{\mu}{2\pi} \sin \frac{4\pi u(x)}{b} = -\frac{\mu}{\pi(1-\nu)} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u'(x') dx'}{x-x'}. \quad (2.22)$$

Dla warunków brzegowych postaci  $u(-\infty) = -u(\infty) = b/4$ , funkcja przemieszczenia jest postaci

$$u = -\frac{b}{2\pi} \arctan \xi, \quad (2.23)$$



Rysunek 2.6: Naprężenia ścinające w zmodyfikowanym przez Foremana, Jaswona i Wooda modelu Peierlsa-Nabarro dla różnych szerokości rdzenia dyslokacji.

gdzie

$$\xi = \frac{x(1-\nu)}{d/2}. \quad (2.24)$$

Wstawiając (2.23) do (2.20), otrzymuje się poszukiwaną funkcję naprężeń Airy'ego

$$\Psi(x, y) = \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} y \ln \left[ x^2 + \left( y \pm \frac{d}{2(1-\nu)} \right)^2 \right], \quad (2.25)$$

gdzie znak „+” odnosi się do rozwiązań dla punktów, których współrzędna  $y \geq 0$ , natomiast znak „-” dla pozostałych (założono układ współrzędnych z osią  $y$  skierowaną do góry). Z ostatniej zależności oraz ze wzorów

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2}, \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2}, \quad \sigma_{xy} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial y \partial x}, \quad (2.26)$$

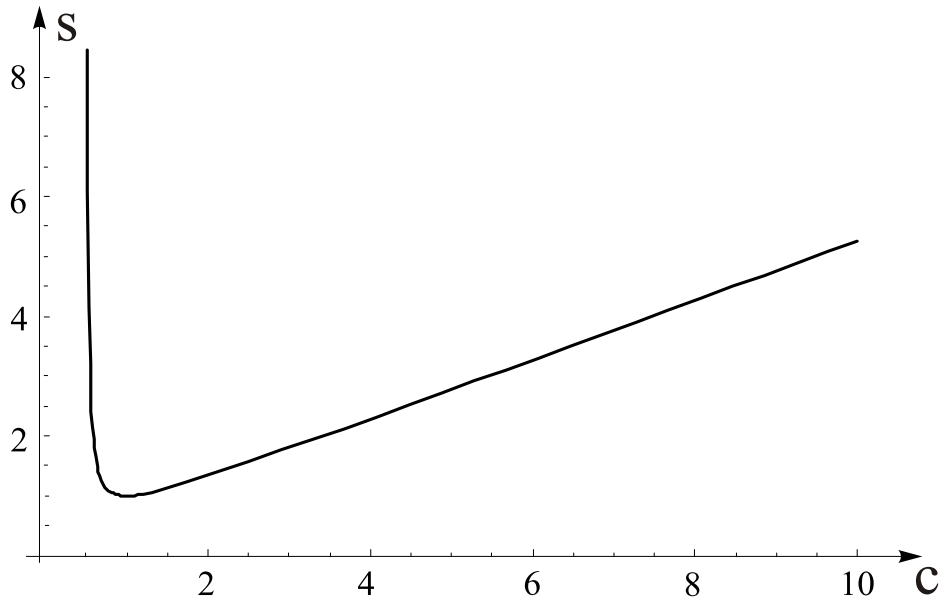
$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}), \quad \sigma_{yz} = \sigma_{zx} = 0 \quad (2.27)$$

wynika, że

$$\sigma_{xx}(x, y) = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{3y \pm \frac{d}{(1-\nu)}}{D} - \frac{2y(y \pm \frac{d}{2(1-\nu)})^2}{D^2} \right), \quad (2.28)$$

$$\sigma_{yy}(x, y) = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{y}{D} - \frac{2x^2 y}{D^2} \right), \quad (2.29)$$

$$\sigma_{xy}(x, y) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{x}{D} - \frac{2xy(y \pm \frac{d}{2(1-\nu)})}{D^2} \right), \quad (2.30)$$



Rysunek 2.7: Relacja pomiędzy szerokością rdzenia dyslokacji w modelu Foremana, Jaswona i Wooda.

gdzie  $D = x^2 + (y \pm d/2(1 - \nu))^2$ . Analogicznie, dla dyslokacji śrubowej, zakładając zamiast przemieszczeń w kierunku osi  $x$  przemieszczenia w kierunku osi  $z$ , otrzymuje się zależności

$$\sigma_{xz}(x, y) = -\frac{\mu b}{2\pi} \left( \frac{y \pm \frac{d}{2(1-\nu)}}{D} \right), \quad (2.31)$$

$$\sigma_{yz}(x, y) = \frac{\mu b}{2\pi} \left( \frac{x}{D} \right). \quad (2.32)$$

Model Peierlsa-Nabarro był modyfikowany, by lepiej opisać oddziaływania międzyatomowe (np. modyfikacje Foreman i in., 1951; Van der Merwe, 1963a,b). Jedną z takich modyfikacji jest metoda rozmycia rdzenia dyslokacji. Foreman, Jaswon i Wood (Foreman i in. (1951)) umożliwili regulację szerokości rdzenia dyslokacji, a tym samym dostosowanie go do wartości otrzymanych z pomiarów eksperymentalnych. Autorzy założyli mianowicie, że postać rozwiązania  $u(x)$  jest nieznacznie zmodyfikowana w stosunku do rozwiązania Peierlsa-Nabarro. Przyjęli przemieszczenia jako funkcję postaci:

$$u(x) = -\frac{b}{2\pi} \left[ \arctan \frac{\xi}{c} + (c-1) \frac{\xi}{c^2 + \xi^2} \right], \quad (2.33)$$

co można również zapisać jako

$$u(x) = -\frac{b}{2\pi} \left[ 1 - \frac{\partial}{\partial c}(c-1) \right] \arctan \frac{\xi}{c}. \quad (2.34)$$

W przypadku gdy parametr  $c$  równy jest jeden, rozwiązanie to jest rozwiązaniem Peierlsa-Nabarro. Naprężenia ścinające na linii  $y = 0$  określone są wzorem

$$\sigma_{xy}(x) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{\xi}{c^2 + \xi^2} + 2c(c-1) \frac{\xi}{(c^2 + \xi^2)^2} \right). \quad (2.35)$$

Na podstawie danych eksperymentalnych szerokość rdzenia dyslokacji może być modelowana poprzez parametr  $c$  w sposób następujący (Rys. 2.7):

$$s(c) = s(1) \frac{c^2}{2c-1}. \quad (2.36)$$

Konsekwencją przyjętej modyfikacji jest także zmiana kształtu wykresów pola naprężeń, por. Rys. 2.6. Tak więc, dużą zaletą tego modelu jest możliwość doboru szerokości rdzenia dyslokacji stosownie do wyników eksperymentalnych.

### 2.2.2 Niedopasowanie sieciowe podłoża i warstwy

Jako podstawowy parametr opisujący niedopasowanie sieciowe warstwy i podłoża przyjmuje się iloraz różnicy stałych sieciowych warstwy i podłoża oraz stałej sieciowej podłoża tj.

$$f_m = \frac{a_{\text{warstwy}} - a_{\text{podłoża}}}{a_{\text{podłoża}}}, \quad (2.37)$$

gdzie  $a_{\text{warstwy}}$  oraz  $a_{\text{podłoża}}$  oznaczają odpowiednio wymiar stałej sieciowej kryształu warstwy oraz kryształu podłoża. Dla struktur o parametrycznie określonym składzie chemicznym, np.  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , parametr niedopasowania sieci we wzorze (2.37) można uzależnić od składu chemicznego, tj.  $f_m(x)$ . Przegląd stałych sieci wybranych materiałów stosowanych w strukturach półprzewodnikowych zamieszczono w Tab. 2.1. Wzrost pseudomorficzny trwa do chwili osiągnięcia przez warstwę energii odkształcenia co najmniej równej energii potrzebnej do utworzenia dyslokacji niedopasowania, tj. takiej, która poprzez nukleację dyslokacji pozwoli zmniejszyć energię sprężystą. Dla wzrostu pseudomorficznego, przy założeniu, że płaski stan naprężeń jest jednorodny, wartość naprężeń można wyznaczyć przy użyciu wzoru (1.2). Dla kryształu o strukturze kubicznej, dla płaszczyzny warstwy (001) oraz przy uwzględnieniu anizotropii właściwości sprężystych warstwy, otrzymuje się relacje na naprężenia w kierunkach osi  $x$  i  $y$

$$\sigma_{11} = C_{11}\varepsilon_{11} + C_{12}\varepsilon_{22} + C_{12}\varepsilon_{33}, \quad (2.38)$$

$$\sigma_{22} = C_{12}\varepsilon_{11} + C_{11}\varepsilon_{22} + C_{12}\varepsilon_{33} \quad (2.39)$$

oraz, ponieważ w kierunku  $z$  powierzchnia jest swobodna, na mocy równania  $\sigma_z = 0$ , zachodzi

$$\varepsilon_{33} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \frac{\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}}{2}, \quad (2.40)$$

	Stała sieciowa [ $10^{-10}$ m]	$C_{11}$ [GPa]	$C_{12}$ [GPa]	$C_{44}$ [GPa]	Źródło dla C
CdTe	6.4770	53.7	37.3	16.4	Walker i in. (1985)
GaAs	5.65325	119.0	53.8	59.5	Tu i in. (1992)
GaP	5.451	140.5	62.1	70.3	Tu i in. (1992)
InAs	6.0583	83.3	45.3	39.6	Tu i in. (1992)
InP	5.8689	101.1	56.1	45.6	Tu i in. (1992)
Si	5.4311	166.0	64.0	79.5	Dunstan (1997)
ZnS	5.4093	104.0	65.0	46.2	Lee (1970)
ZnSe	5.6676	85.9	50.6	40.6	Lee (1970)
ZnTe	6.1037	71.1	40.7	31.3	Lee (1970)

Tablica 2.1: Rozmiar sieci krystalicznych oraz stałe sztywności niektórych materiałów stosowanych w warstwach epitaksjalnych.

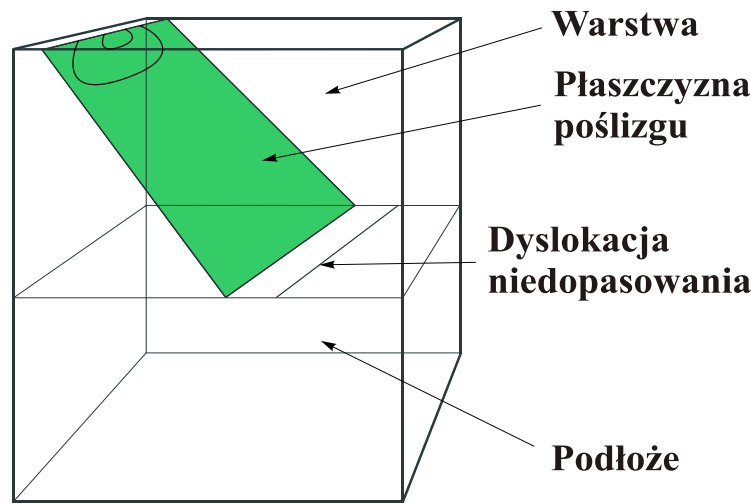
co prowadzi do zależności

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} = \left( C_{11} + C_{12} - 2 \frac{C_{44}^2}{C_{11}} \right) f_m. \quad (2.41)$$

Różnica pomiędzy stosowaniem uproszczonego modelu izotropowego oraz modelu anizotropowego może być znaczna. Przykładowo, dla kryształu krzemu stała Lamego wynosi 68.1 GPa, współczynnik Poissona 0.218, natomiast stałe  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  podano w Tab. 2.1. Stąd, przy niedopasowaniu  $f_m = 0.02$ , dla modelu izotropowego (wzór 1.2) naprężenia wynoszą  $\sigma_0 = 3.606$  GPa, podczas gdy dla modelu anizotropowego (wzór 2.41) aż  $\sigma_0 = 4.242$  GPa. Różnica wynosi około 17%. Stosowanie modelu izotropowego znacznie odbiega od zachowania się materiału, który zazwyczaj jest anizotropowy, ale w wielu przypadkach takie uproszczenie jest stosowane (np. Atkinson i Jain, 1992; Shintani, 1996). Dla uproszczenia opisu świadomie pomija się anizotropię własności mechanicznych. Dla orientacji wzrostu kryształu innych niż (001) można wyznaczyć relacje analogiczne do (2.41). I tak, np. dla kierunku wzrostu [111] stosowana jest zależność

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} = \frac{6 C_{44}(C_{11} + 2C_{12})}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} f_m. \quad (2.42)$$

Wyznaczając energię odkształcenia pseudomorficznego warstwy, przy wykorzystaniu zależności (2.41), i porównując ją z energią potrzebną do powstania dyslokacji można wyznaczyć grubość warstwy, przy której nastąpi nukleacja dyslokacji. Grubość taką określa się jako grubość krytyczną.



Rysunek 2.8: Schemat powstawania dyslokacji niedopasowania.

**Grubość krytyczna.** Bardzo ważnym parametrem wykorzystywanym w opisie heterostruktur jest grubość krytyczna (przegląd w pracy Pinardi i in., 1998). Jest to wysokość, po osiągnięciu której w wolnej od dyslokacji warstwie, rosnącej i odkształcającej się pseudomorficznie, pojawiają się dyslokacje. Uwalniają one zmagazynowaną energię sprężystą, zob. Rys. 1.4. Grubość krytyczna potrzebna jest do oceny, jak grubą warstwę rosnącego kryształu można osiągnąć bez nukleacji dyslokacji. Jeden ze sposobów nukleacji dyslokacji niedopasowania przedstawiono na Rys. 2.8. W niniejszej pracy nie będą rozpatrywane zagadnienia powstawania dyslokacji niedopasowania, a jedynie analiza struktur już je zawierających. Grubość krytyczna zależy od wielu czynników. Można ją wyznaczyć np. ze wzoru, (Jesser i Kuhlmann-Wilsdorf, 1967),

$$h_{cr} = -\frac{\mu_0 b^2 \ln \left[ \frac{4\pi\mu_0\mu_1(a_0-a_1)}{(\mu_0+\mu_1)\bar{\mu}(a_0+a_1)(1-\nu)} \right]}{2\pi a_0 f (1+2\pi)(\mu_0+\mu_1)}, \quad (2.43)$$

gdzie  $f = \frac{a_0-a_1}{a_1}$ . Wskaźniki 0 i 1 odpowiadają odpowiednio podłożu i warstwie (również we wzorach poniżej). W powyższym wzorze oznaczono odpowiednio:  $a$  parametr sieci,  $\mu_0$ ,  $\mu_1$  stałe Lamego podłoża i warstwy,  $\bar{\mu}$  stałą Lamego interfejsu,  $\nu$  współczynnik Poissona,  $b$  długość wektora Burgersa,  $b_e$  długość składowej krawędziowej wektora Burgersa. Wzór ten pochodzi z początkowej fazy rozwoju teorii i obecnie nie jest już stosowany. Matthews i Blakeslee (1974), na podstawie równowagi sił potrzebnych do ruchu dyslokacji, zaproponowali zależność

$$h_{cr} = \frac{b}{8\pi f} \frac{(1-\nu \cos^2 \eta)}{(1+\nu) \cos \lambda} \ln \left( \frac{h_{cr}}{b} + 1 \right). \quad (2.44)$$



W powyższym wzorze  $\lambda$  oznacza kąt pomiędzy wektorem Burgersa, a wektorem poślizgu dyslokacji, natomiast  $\eta$  oznacza kąt pomiędzy wektorem Burgersa, a linią dyslokacji. Warto również wspomnieć o równaniu People i Beana (People i Bean, 1985):

$$h_{cr} = \frac{1 - \nu}{1 + \nu} \frac{1}{16\pi\sqrt{2}} \frac{b^2}{a} \frac{1}{f^2} \ln \left( \frac{h_{cr}}{b} \right), \quad (2.45)$$

w którym  $a$  oznacza stałą sieciową warstwy. Zależność zaproponowana przez People i Beana znalazła potwierdzenie eksperymentalne (Hull i Fischer-Colbrie, 1987; Orders i Usher, 1987), ale mimo tego sposób jej wyprowadzenia został ostro skrytykowany (Hu, 1991a). Kontrowersje dotyczą przyjętej w pracy People i Bean (1985) koncepcji powierzchni, na którą przypada energia pojedynczej dyslokacji.

Grubość krytyczna wyznaczana jest przy pomocy wielu metod np. z równowagi energii wynikających z odkształcenia w filmie i energii odkształcenia związanej z dyslokacją (zob. Matthews, 1975; Wagner i in., 1989a,b; Jain i in., 1997a) czy z równowagi sił działających na dyslokację poruszającą się ku powierzchni połączenia materiałów (zob. Freund, 1990; Hu, 1991b,a). Wyniki eksperymentalne wskazują na dużą rozbieżność wartości rzeczywistych z wyznaczanymi na podstawie modeli (Wagner i in., 1989b; Jain i in., 1996). Zauważono, że rozbieżność ta zmniejsza się wraz ze zwiększaniem temperatury wzrostu. Wskazuje to, że źródłem rozbieżności może być nie uwzględnienie niektórych z czynników niezbędnych do powstania dyslokacji. Istniejące modele fenomenologiczne wydają się zgadzać z wynikami eksperymentalnymi jedynie w bardzo ograniczonym zakresie (szczegółową dyskusję zawierają m. in. prace Hu, 1991a; Jain i in., 1997a; Pinardi i in., 1998). Bardziej złożone równania, uwzględniające więcej czynników, wyprowadzane są np. z oszacowań energii pętli dyslokacyjnych i energii potrzebnej do powstania takich pętli oraz z uwzględnienia wpływu energii powierzchniowej. Warto podać jako odniesienie do dalej analizowanego połączenia kryształów, że dla heterostruktur ZnTe/GaAs oraz CdTe/ZnTe zaobserwowano  $h_{cr}$  wynoszącą odpowiednio 1.2 i 1.6 nm (Cibert i in., 1990; Bauer i in., 1994). Przegląd prób konstrukcji modelu do wyznaczania grubości krytycznej zawierają prace Wagner i in. (1989b); Jesser i Van der Merwe (1989); Pinardi i in. (1998).

### 2.2.3 Energia dyslokacji niedopasowania

**Pojedyncze dyslokacje.** Teoria sprężystości pozwala na uzyskanie rozwiązań analitycznych pola naprężeń wokół dyslokacji (np. Steeds i Willis, 1979). Naturalnym wydaje się więc wykorzystanie tych rozwiązań do wyznaczania naprężeń w warstwach epitaksjalnych. Specyfika zagadnienia wymusza jednak nałożenie pewnych ograniczeń

na istniejące rozwiązania lub znaczne ich modyfikacje. Najczęściej stosowanymi zależnościami są te, korzystające z liniowej teorii sprężystości (2.3-2.4, 2.5-2.9). Z drugiej strony, ze względów praktycznych (stabilność produktów, ich żywotność) bardzo istotne są zależności opisujące energię układu dyslokacji. Poniżej omówiono sposób wyznaczania energii warstwy epitaksjalnej zawierającej dwie rodziny dyslokacji wzajemnie do siebie prostopadłych. Energię związaną z wprowadzeniem pojedynczej dyslokacji można opisać zależnością:

$$U_d^* = \frac{\mu b^2 f(\nu)}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_c}\right), \quad (2.46)$$

gdzie przez  $R$  oznaczono zasięg pola naprężeń wywoływanego przez dyslokację. W zależności od indywidualnych oszacowań przyjmuje się różne wartości zasięgu  $R$ . Najczęściej jako równy połowie odległości pomiędzy dyslokacjami lub odległości dyslokacji od brzegu swobodnego. Wartość  $r_c$  przyjmuje się równą ok.  $b/4$  (np. Suzuki i in., 1991). Na postawie (2.46), energię układu dyslokacji o gęstości  $\rho_d$ , opisać można zależnością

$$U_d = \rho_d \frac{\mu b^2 f(\nu)}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_c}\right). \quad (2.47)$$

W powyższych wzorach wartość  $f(\nu)$  przyjmuje się (Ball i Van Der Merwe, 1983) równą

- 1 dla dyslokacji śrubowej,
- $1/(1 - \nu)$  dla dyslokacji krawędziowej,
- $(1 - \frac{\nu}{2})/(1 - \nu)$  średnio dla dyslokacji śrubowych i krawędziowych.

Najczęściej zakłada się, że odległość pomiędzy dyslokacjami jest stała, co, jak pokazano w pracach Atkinson i Jain (1992, 1993); Jain i in. (1993), obniża energię układu dyslokacji w stosunku do rozkładu niejednorodnego. Bezpośrednim powodem podjęcia bardziej szczegółowych badań przez w/w autorów była niezgodność pomiędzy przewidywaniami teoretycznymi, a obserwowanymi w eksperymentach wartościami grubości krytycznej. Różnice pomiędzy teorią a obserwowanymi wartościami mogą być prawie dziesięciokrotne (zob. Matthews i Crawford, 1970).

**Energia układów dyslokacji.** Dane o energii zmagazynowanej w warstwach epitaksjalnych są niezbędne do wyznaczenia konfiguracji minimum energetycznego, czy też wyznaczania nadwyżki energetycznej obserwowanej konfiguracji dyslokacji. Dane takie umożliwiają poznanie sił konfiguracyjnych, dążących do minimum energetycznego, choć niekoniecznie go osiągających (Atkinson i Jain, 1992, 1993). Zagadnienie wyznaczenia energii układu dyslokacji jest bardzo ważne. Poniżej przedstawiono jedną z prób analitycznego oszacowania tej energii (Atkinson i Jain, 1992). W zdecydowanej większości

prac z zakresu wyznaczania naprężeń w warstwach epitaksjalnych wykorzystywana jest liniowa teoria sprężystości. Stosując ją można sumować naprężenia pochodzące od różnych źródeł, np. od poszczególnych dyslokacji. W pracy Atkinson i Jain (1992) rozpatrywana jest grupa dyslokacji o równoległych liniach dyslokacyjnych. W odniesieniu do schematu z Rys. 2.9, przedstawiającego dwie rodziny dyslokacji o wzajemnie prostopadłych liniach dyslokacyjnych, w w/w pracy przeanalizowano jedną z nich. Naprężenie w filmie można wyznaczyć, zob. wzór (1.2), z zależności:

$$\sigma_0 = -2\mu \frac{1+\nu}{1-\nu} f_m, \quad (2.48)$$

Powyższy wzór wyprowadzono przy następujących założeniach:

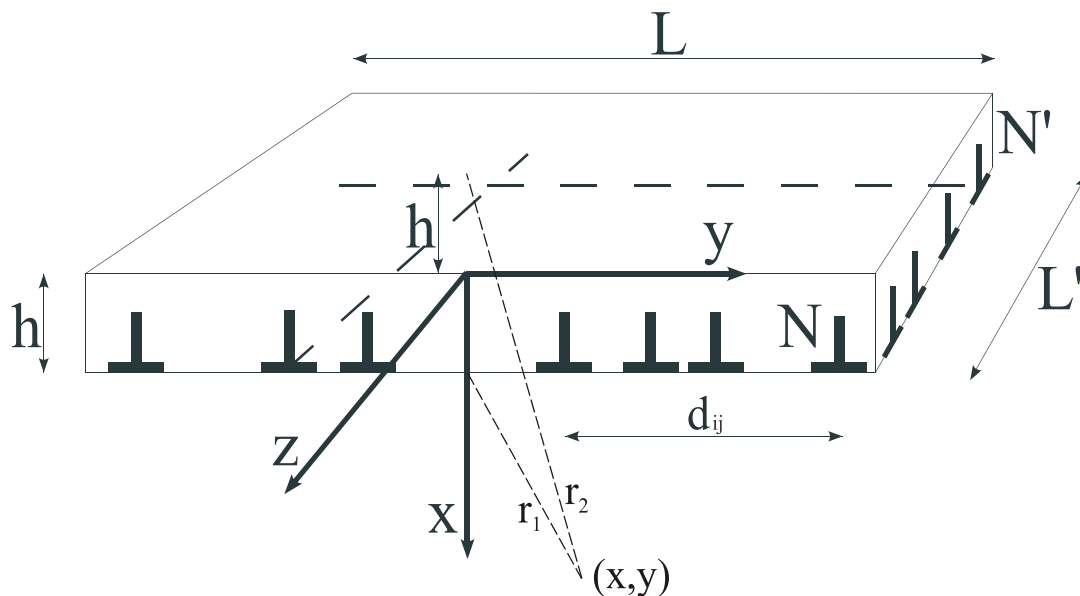
1. Grubość warstwy  $h$  jest mniejsza od  $h_{cr}$ .
2. Stan odkształceń jest płaski.
3. Stan odkształceń jest jednorodny i może być opisany wzorem (1.1).

Na podstawie (1.1) oraz (2.48), można wyznaczyć energię zmagazynowaną w warstwie

$$W_0 = LL' 2\mu \frac{1+\nu}{1-\nu} f_m^2 h. \quad (2.49)$$

Ze wzorów (2.48) i (2.49) wynika, że naprężenia są liniową funkcją odkształceń, a energia odkształcenia funkcją kwadratową odkształceń. Ponieważ głównym celem analizy jest możliwość wyznaczenia energii wprowadzonej do materiału, a pochodzącej z różnych źródeł, Atkinson i Jain wprowadzili pojęcie energii interakcji. Jest to energia wynikająca z interakcji zarówno pomiędzy dyslokacjami, jak i pomiędzy dyslokacjami i innymi czynnikami.

Dotychczas energię zawartą w warstwach epitaksjalnych zawierających dyslokacje wyznaczano analitycznie, przy założeniu równych odległości pomiędzy dyslokacjami w warstwie oraz dla nieskończonej długości warstwy. Sformułowanie zaprezentowane w pracy Atkinson i Jain (1992) uwzględnia zarówno niejednorodność rozkładu dyslokacji w warstwie, jak i skończone wymiary warstwy. Wyznaczanie zmagazynowanej energii przebiega w następujący sposób: rozpoczynając od deformacji pseudomorficzej, sumowane są przyrosty energii od kolejno wprowadzanych dyslokacji. Energia wprowadzenia dyslokacji do warstwy równa jest pracy wykonanej na przemieszczeniu wirtualnej półpłaszczyzny na długości wektora Burgersa  $b$  przeciwko siłom wewnętrznym, działającym na tę półpłaszczyznę. Energie pochodzące od poszczególnych dyslokacji są sumowane wraz z energiami interakcji pomiędzy nimi. Klasycznie przyjmuje się, że energia sprężysta dyslokacji jest to energia zmagazynowana poza rdzeniem dyslokacji.



Rysunek 2.9: Schemat obszaru niedopasowania warstwy epitaksjalnej wraz z dwiema prostokątnymi grupami dyslokacji.

W analizowanym przypadku przyjęto rdzeń, jako koło o promieniu  $b$ . Dla układu  $N$  dyslokacji równoległych do osi  $z$  (wg. oznaczeń z Rys. 2.9), rozmieszczonych wzdłuż osi  $y$ , powyższe założenia prowadzą do następującego wyrażenia na energię układu dyslokacji

$$W_N = W_0 - N \sigma_0 b_y h L' + N E_D L' + \frac{L'}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N E_I(d_{ij}), \quad (2.50)$$

gdzie  $E_D, E_I(d_{ij})$  oznaczają odpowiednio energię własną dyslokacji i energię interakcji pomiędzy dyslokacjami oddalonymi od siebie o odległość  $d_{ij}$ . Indeksy  $i, j$  przebiegają od 1 do  $N$ . Drugi człon po prawej stronie (2.50) opisuje pracę wykonaną przez naprężenia na pseudomorficzej deformacji warstwy, trzeci opisuje sumę energii własnych dyslokacji, a czwarty opisuje sumę energii interakcji pomiędzy dyslokacjami.

W przypadku dwóch grup dyslokacji o wzajemnie prostokątnych liniach dyslokacyjnych zakłada się, że niedopasowanie sieciowe  $f_m$  ma tą samą wartość w obu kierunkach linii dyslokacyjnych, oraz, że dyslokacje mogą posiadać składowe śrubowe wektora Burgersa. Może to być również dyslokacja krawędziowa, której linia nie jest równoległa do osi  $y$  lub  $z$  (wg. Rys. 2.9). Na każdą dyslokację z pierwszej grupy, oprócz oddziaływań ujętych we wzorze (2.50), oddziałuje dodatkowe naprężenie. Wynika ono z odkształceń wywołanych przez dyslokacje drugiego układu. Odkształcenia wywołane przez dyslokacje pierwszej grupy można wyznaczyć przez następujące uśrednienie

$$\langle \epsilon_{yy} \rangle = \frac{N b_y}{L}, \quad \langle \epsilon_{zy} \rangle = \frac{N b_z}{2 L'}, \quad (2.51)$$

a stąd dodatkowe naprężenia na układzie drugiej grupy, wywołane odkształceniami w pierwszej grupie, mają postać

$$\langle \sigma_{zz} \rangle = \frac{2\mu\nu}{(1-\nu)} \langle \epsilon_{yy} \rangle, \quad \langle \sigma_{zy} \rangle = 2\mu \langle \epsilon_{zy} \rangle \quad (2.52)$$

i analogicznie dla wpływu drugiej grupy dyslokacji na pierwszą. Wprowadzenie tych oddziaływań pozwala na wyrażenie energii dwuwymiarowego układu dyslokacji w następującej postaci

$$\begin{aligned} W_{NN'} = & W_0 - \sigma_0 b_y h (NL' + N'L) + NN' \mu h \left[ \frac{2\nu b_y^2}{1-\nu} - b_z^2 \right] \\ & + E_D (NL' + N'L) + \frac{L'}{2} \sum_{\substack{1 \\ i \neq j}}^N E_I(d_{ij}) + \frac{L}{2} \sum_{\substack{1 \\ i' \neq j'}}^{N'} E_I(d_{i'j'}). \end{aligned} \quad (2.53)$$

Energię własną linii dyslokacji na jednostkę długości, w odległości  $h$  od powierzchni swobodnej (przy pominięciu niesprężystej energii rdzenia dyslokacji o promieniu  $q$ ), wyznaczono z zależności

$$E_D = -\frac{1}{2} \sum_0^{h-q} [b_y \sigma_{yy}(x, 0) + b_x \sigma_{xy}(x, 0) + b_z \sigma_{zy}(x, 0)] dx, \quad (2.54)$$

natomiast energię interakcji ze wzoru

$$E_I(d) = -\frac{1}{2} \sum_0^{h-q} [b_y \sigma_{yy}(x, d) + b_x \sigma_{xy}(x, d) + b_z \sigma_{zy}(x, d)] dx. \quad (2.55)$$

Wartości naprężeń, we wzorach (2.54) i (2.55), Atkinson i Jain wyznaczyli z różniczkowania funkcji naprężeń Airy'ego (2.26)-(2.27), przy czym

$$\begin{aligned} \chi = & \left\{ \frac{\mu b_x}{2\pi(1-\nu)} \right\} \left[ y (\ln r_2 - \ln r_1) - \frac{2hxy}{r_2^2} \right] \\ & + \left\{ \frac{\mu b_y}{2\pi(1-\nu)} \right\} \left[ -(x-h) \ln r_1 + (x-h) \ln r_2 - h + \frac{2hx}{r_2^2} (x+h) \right]. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Analogiczne oszacowanie dla jednorodnego rozkładu dyslokacji zaproponowano w pracy Willis i in. (1990). Wartości energii wg. wzoru (2.53), dla jednorodnego rozkładu dyslokacji, zgadzają się z propozycjami Willisa. W powyższy sposób można też wyznaczyć energię niejednorodnie rozmieszczonych dyslokacji. Metoda opisana powyżej została zmodyfikowana w pracy Jaina (Jain i in., 1993) przez zastosowanie rozkładu gęstości prawdopodobieństwa. Zaproponowane przez Atkinsona i Jaina sformułowanie pozwala określić relaksacje odkształceń również ilościowo. Wyznaczenie energii układów dyslokacji pomaga w ocenie stopnia zdefektowania. Autorzy wyciągnęli wniosek, że dla danej

energii warstwy całkowita liczba dyslokacji przy niejednorodnym rozkładzie dyslokacji jest mniejsza, od liczby dyslokacji przy rozkładzie jednorodnym, a to pozwala częściowo wyjaśnić dotychczasowe niezgodności wyników eksperymentalnych z modelami teoretycznymi.

## 2.3 Metody numeryczne

Rozwój metod numerycznych pozwala uznać wyznaczone przy ich użyciu wyniki jako osobną klasę rozwiązań. Do wyznaczania naprężeń oraz konfiguracji równowagowych dyslokacji w warstwach epitaksjalnych najszerzej stosowane są metoda elementów skończonych oraz dynamika molekularna.

Metoda elementów skończonych, ze względu na swą elastyczność i szeroko dostępne pakiety komercyjne, jest stosowana praktycznie we wszystkich obszarach technologii struktur półprzewodnikowych (np. Van Mieghem i in., 1994; Jain i in., 1995, 1997b; Schwarz i Chidambarao, 1999). Metoda elementów skończonych jako jedna z niewielu daje możliwość zbadania wpływu uproszczeń w metodach analitycznych (równe stałe sztywności warstwy i podłoża, nieodkształcalne podłoże) na końcowe rozwiązanie. Umożliwia także uzyskanie rozwiązań dla struktur o skomplikowanej geometrii. W symulacjach numerycznych heterostruktur za pomocą metody elementów skończonych, różnicę w stałych sieciowych kryształów łączonych wprowadza się zwykle poprzez zadanie różnych współczynników rozszerzalności cieplnej dla poszczególnych składników heterostruktury (np. Tillmann i in., 2000; Kret i in., 2001). Zadanie odpowiedniego poziomu temperatury wywołuje zmianę stałych sieciowych (zob. Christiansen i in., 1996; Kret i in., 2001). Zdecydowana większość obliczeń za pomocą metody elementów skończonych przeprowadzana jest bez uwzględnienia nieliniowości geometrycznej. Spośród dostępnych rozwiązań praktycznych, użytecznych w zagadnieniach technologicznych, warto wymienić prace Hu (1979); Van Mieghem i in. (1994); Jain i in. (1995, 1997b); Schwarz i Chidambarao (1999); Zang i Bower (1999).

Dyskretne metody atomowe analizują modelowany ośrodek materialny na poziomie atomowym. Celem symulacji jest wyznaczenie trajektorii ruchu poszczególnych atomów. Bardzo dokładne rozwiązania uzyskuje się wykorzystując równania Schrödingera. Metody korzystające z niego nazywane są metodami „ab initio” lub „first-principles”. Wyniki otrzymane przy ich użyciu są dokładne, ale ich uzyskanie wymaga dużej mocy obliczeniowej. Metoda ta może więc być stosowana jedynie do analizy obszaru zawie-

rającego małą liczbę atomów (Ducastelle, 2000). Wykorzystanie funkcji energii  $V$ :

$$V = \sum_i \sum_{j, i \neq j} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (2.57)$$

zależnej tylko od położenia atomów, daje mniejszą dokładność, ale nie wymaga aż tak dużych mocy obliczeniowych. Metody takie są określane jako metody dynamiki molekularnej. Trajektorie ruchu atomów wyznacza się z równań ruchu Newtona

$$m_i \frac{\partial^2}{\partial t^2} x_i = - \frac{\partial}{\partial x_i} V. \quad (2.58)$$

Potencjał oddziaływania międzyatomowego  $\Phi$  (wzór 2.57) determinuje mechaniczne właściwości materiału. Spośród wielu stosowanych potencjałów warto wymienić potencjały: Lennarda-Jonesa, Finnis-Sinclaira, Stillinger-Webera, Tersoffa, Keatinga, (zob. np. Finnis i Sinclair, 1984; Stillinger i Weber, 1985; Tersoff, 1988; Stephenson i in., 1996). Zakładając postać potencjału, przyjmując wartości jego parametrów oraz rozwiązując równania równowagi, można śledzić w czasie położenia każdego z atomów. Współczynniki potencjałów atomowych wyznaczane są na podstawie wyników eksperymentalnych, a także poprzez inne metody numeryczne (np. ab initio). Przyjmuje się, że potencjały takie mogą być stosowane tylko w wąskim zakresie procesów (zob. uwagi w pracach Duesbery, 1989; Raabe, 1998; Ducastelle, 2000). Wydawać by się mogło, że po przyjęciu potencjału międzyatomowego i dopasowaniu parametrów potencjału do wyników eksperymentalnych, uzyskuje się parametry, charakterystyczne dla danego materiału. Praktyka pokazuje jednak, że w analizie dyskretnego ruchu atomów różnica w zachowaniu się atomów wewnątrz materiału i blisko warstwy wierzchniej, czy w obszarach defektów struktury odgrywa istotną rolę (Ducastelle, 2000). Parametry potencjału międzyatomowego zazwyczaj charakteryzują zachowanie się materiału tylko w małej grupie procesów. W innych, nawet nieznacznie się różniących warunkach, parametry powinny być ponownie zweryfikowane. Przyjmuje się więc, że weryfikacja potencjału oraz przyjętych parametrów powinna być dokonywana każdorazowo (zob. np. Scheerschmidt i in., 2000). Jest to największa wada dynamiki molekularnej.

Potencjały opisujące wiązania w materiale poprzez funkcję atom-atom należą do najprostszych. Nazywane są one potencjałami dwuelementowymi. Jednym z nich jest potencjał Lennarda-Jonesa

$$\Phi_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]. \quad (2.59)$$

Człon  $\frac{1}{r_{ij}^{12}}$  odpowiada za odpychanie gdy atomy zbliżają się do siebie, natomiast człon  $\frac{1}{r_{ij}^6}$  odpowiada za przyciąganie związane z siłami van der Waalsa. Parametry  $\epsilon$  oraz

$\sigma$  należy wyznaczyć z danych eksperymentalnych. Oprócz postaci potencjału należy jeszcze wyspecyfikować promień oddziaływania cząstek  $R_c$ . Tak więc potencjał (2.57) uwzględniający skończony promień oddziaływań przyjmowany jest w postaci

$$V = \begin{cases} \Phi_{LJ}(r) - \Phi_{LJ}(R_c) & \text{dla } r \leq R_c \\ 0 & \text{dla } r > R_c \end{cases}. \quad (2.60)$$

Potencjał Lennard-Jonesa dobrze się sprawdza w opisie zachowania materiałów, w których dominującymi oddziaływaniami są wiązania van der Waalsa (Raabe, 1998). Stosowany jest głównie do symulacji gazów szlachetnych, na przykład argonu. Zastosowanie go do symulacji w ciałach stałych, podobnie jak innych potencjałów dwuelementowych, obarczone jest bardzo dużym błędem. Dlatego też obecnie częściej stosowane są potencjały wielocząłkowe (Ducastelle, 2000). Można je przedstawić w postaci

$$V = \frac{1}{2} \sum_{j,i \neq j} \Phi(r_{ij}) + \sum_i \Psi(w_i), \quad (2.61)$$

gdzie  $\Phi(r_{ij})$  jest członem energii oddziaływania atom-atom, natomiast  $\Psi(w_i)$  jest energią atomu będącą funkcją jego wiązań. Funkcję  $w_i$  można zapisać jako

$$w_i = \sum_{\substack{j \\ (j \neq i)}} \Lambda(r_{ij}), \quad (2.62)$$

gdzie  $\Lambda(r_{ij})$  zależy od odległości międzyatomowej. Potencjały stosowane w modelach Finnis-Sinclaira (Finnis i Sinclair, 1984), embedded atom method (Daw i Baskes, 1984) czy glue method (Ercolessi i in., 1988) można przedstawić w postaci (2.61). Potencjały te znacznie lepiej nadają się do opisu metali, niż potencjały dwuelementowe. Do opisu zachowania półprzewodników najczęściej stosowane są potencjały: Stillinger-Webera (Stillinger i Weber, 1985; Angelo i Mills, 1995) oraz Tersoffa (Tersoff, 1988). Pierwszy z nich jest postaci

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Phi(r_{ij}) + \sum_{i,j,k} g(r_{ij}) g(r_{ik}) \left( \cos \theta_{jik} + \frac{1}{3} \right)^2, \quad (2.63)$$

gdzie  $g(r_{ij})$  jest malejącą funkcją odległości międzyatomowej, natomiast  $\theta_{jik}$  jest kątem pomiędzy wiązaniami  $ji$  oraz  $ik$ . Człon  $(\cos \theta_{jik} + \frac{1}{3})$  wprowadzono dla uprzywilejowania rozkładu przestrzennego atomów, dla którego kąt pomiędzy wiązaniami odpowiada kątowi obserwowanemu w strukturze diamentu. Potencjał ten niezbyt wiarygodnie opisuje zachowanie się materiału w pobliżu jego powierzchni. Istnieją jednak modyfikacje dostosowujące go również do opisu w tym obszarze (zob. np. Stephenson i in., 1996).



Nieco bardziej skomplikowanym potencjałem, który również zawiera człony opisujące kąty pomiędzy wiązaniami atomowymi, jest potencjał Tersoffa:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Phi_A(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B(G_{ij}) \Phi_B(r_{ij}), \quad (2.64)$$

w którym

$$G_{ij} = \sum_k f_c(r_{ij}) g(\theta_{jik}) f(r_{ij} - r_{ik}). \quad (2.65)$$

Funkcje  $f_c, g, f, B, \Phi_A, \Phi_B$  są parametrami tego potencjału. Jakkolwiek potencjał ten może być stosowany w znacznie szerszym zakresie procesów niż potencjał Stillinger-Webera, okupione jest to jednak trudniejszym doбором parametrów. Do jego określenia należy podać aż sześć funkcji. Każdy z podanych powyżej oraz innych dostępnych w literaturze potencjałów ma swój obszar zastosowań. Jedne dobrze nadają się do opisu materiałów o wiązańach jonowych, inne do materiałów o wiązańach kowalencyjnych, a jeszcze inne do materiałów o specyficznej strukturze krystalicznej. Przyjęcie określonego potencjału wiąże się jednocześnie z określeniem materiału, który będzie badany, jak również z określeniem wielkości, z których będą wyznaczane parametry potencjału (np. ze stałych sztywności, stałych sieciowych czy temperatury topnienia). Wspomniane powyżej niekorzystne właściwości metody powodują, że rozwój dynamiki molekularnej kieruje się obecnie w stronę uwzględnienia wielkości z obszaru mechaniki kwantowej. Pozwala to uwzględnić kierunkowy charakter wiązań atomowych oraz strukturę pasm przewodnictwa. Znacznie wzrasta wtedy zapotrzebowanie na moc obliczeniową komputerów. Z kolei przy zadanej mocy obliczeniowej ogranicza to liczbę atomów w symulacji. O ile w symulacjach z użyciem klasycznych potencjałów (opisanych przez funkcję energii  $V$ ) można objąć kilka milionów atomów, to, jak podaje Srivastava i in. (2001), dokładniejsze symulacje z użyciem metod mechaniki kwantowej mogą objąć tylko kilkaset. Połączenie zalet obu tych metod można uzyskać poprzez weryfikację parametrów klasycznych potencjałów za pomocą metod mechaniki kwantowej.

Metoda dynamiki molekularnej, mimo ograniczeń przedstawionych powyżej, zyskała szczególną popularność w analizie defektów na podstawie obrazów mikroskopowych (jako przykład mogą służyć prace Vitek, 1974, 1976; Wolf i in., 1991; Vellinga i in., 1997; Justo i in., 1999; De Hosson i in., 1999; Scheerschmidt i in., 2000). Przykłady informacji, jakie można uzyskać z połączenia symulacji obrazów mikroskopowych z teoriami kontynualnymi zawierają m. in. prace Bonnet i Loubradou (1994) oraz Villa i in. (1995). Na podstawie obrazów z wysokorozdzielczego mikroskopu elektronowego, autorzy tych prac porównali pozycje atomów wygenerowane za pomocą odpowiedniego programu analizy obrazu z pozycjami atomów uzyskanych z pomocą klasycznych modeli teorii

sprężystości (Volterra, Somigliana). Poprzez to porównanie możliwa była ocena przydatności metod kontynualnych w zakresie bardzo dużych odkształceń. Bonnet i Loubradou wysuwają wniosek, że model Volterry nie nadaje się do wyznaczania pozycji kolumn atomowych w obszarze rdzeni dyslokacji. Ważną informacją uzyskaną z powyższych symulacji jest to, że pominięcie anizotropii w takim opisie nie wnosi dużych błędów i tym samym jest dopuszczalnym uproszczeniem. Obecnie dostępne są komercyjne pakiety programów komputerowych do symulacji obrazów mikroskopowych. Narzędzia te są użyteczne m. in. do wyznaczania stężenia poszczególnych składników związków potrójnych na podstawie odkształceń struktury (przy wykorzystaniu prawa Vegarda) (przykład czego zawiera m. in. praca Tillmann i in., 2000).

Inną metodą pozwalającą na wyznaczenie stabilnych konfiguracji dyslokacji jest dynamika dyslokacji (Raabe, 1998). W przypadku trójwymiarowym, zakrzywiona dyslokacja modelowana jest jako grupa odcinków linii dyslokacyjnej. Każdy z tych odcinków jest obiektem, dla którego wyznaczane są wywierane na niego siły. Siły te pochodzą od pola naprężeń wywoływanego przez: obciążenie zewnętrzne, pozostałe odcinki linii dyslokacji oraz odcinki innych linii dyslokacji (inne zob. w książce Raabe, 1998). Składowa siły wywieranej na segment linii dyslokacyjnej, która może prowadzić do ruchu dyslokacji wyznaczana jest z zależności:  $\mathbf{f} = (b_i \sigma_{ij} n_j)(\mathbf{n} \times \mathbf{dl})$ , gdzie  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{n}$ ,  $\sigma$ ,  $\mathbf{dl}$  oznaczają odpowiednio wektor Burgersa, wektor normalny do płaszczyzny, po której porusza się dyslokacja, tensor naprężeń oraz część linii dyslokacyjnej, na którą siła ta jest wywierana (Schwarz, 1999a,b). W pracy Schwarz i Chidambarrao (1999) metoda ta pozwoliła na wyznaczenie stabilnych położenia linii dyslokacji w przypadku skomplikowanej geometrii naroży filmu. Metoda dynamiki dyslokacji ma jednak poważne ograniczenia - interakcja pomiędzy liniami dyslokacji zachodzi wyłącznie poprzez stan naprężeń, wywoływany przez poszczególne odcinki linii dyslokacji. Nie ma natomiast możliwości opisu bezpośredniej interakcji linii dyslokacji. Całkowicie pomija się opis rdzenia dyslokacji, a tym samym pomijany jest wpływ rdzenia dyslokacji na jej ruch. Dyslokacje traktuje się jako obiekty rozłączne z ośrodkiem ciągłym. Symulacja ośrodka ciągłego i linii dyslokacji zachodzi równolegle – wyznaczanie naprężeń w ośrodku ciągłym i ruchu dyslokacji są rozseparowane, na co pozwala teoria liniowa. Opis jest znacznie uproszczony, ale dzięki temu jest bardziej użyteczny w zastosowaniach technologicznych.

Ponieważ dyslokacje zajmują zwykle małą część objętości materiału racjonalna wydaje się symulacja łącząca metody dyskretne w obszarach rdzeni dyslokacji oraz metody mechaniki kontynualnej w pozostałym obszarze. Na połączeniu obu obszarów stosować można np. funkcje Greena (Sinclair i in., 1978; Rao i in., 1998). Metoda taka jest bardzo ekonomiczna i zapewne w przyszłości będzie stosowana na znacznie szerszą skalę, niż

w chwili obecnej (zob. również Tadmor i in., 1996). Szeroki przegląd stosowanych obecnie metod numerycznych w zakresie mechaniki materiałów, również w zakresie mikro- i nanomateriałów, zawarty jest w książce Raabe (1998).

# Rozdział 3

## Pomiar dystorsji sieci

W niniejszej pracy wykorzystano wyniki pomiarów pola dystorsji sieci wykonane przez Sławomira Kreta z Instytutu Fizyki PAN w Warszawie. Do pomiaru dystorsji sieci wykorzystano metodę fazy geometrycznej (zmodyfikowaną metodę mory). Metoda mory została zastosowana do pomiaru odkształceń sieci przez Bassetta już w roku 1958. Dobierając kryształ o odpowiednio dużych odległościach międzyatomowych, można wyznaczyć odległości międzyatomowe w innym kryształe również w przypadku, gdy są one mniejsze od najmniejszych odległości możliwych do wyznaczenia bezpośrednio. Jest to możliwe dzięki zastosowaniu interferencji fal przechodzących przez badany materiał oraz materiał o większej stałej sieciowej. Można wtedy wyznaczyć odległości pomiędzy atomami poprzez analizę obrazu interferencyjnego (Amelinckx i in., 1970; Stowell, 1975). Metoda ta pozwala także na wyznaczanie odkształceń m. in. w warstwach epitaksjalnych. Jako przykład zastosowania metody mory do wyznaczania odkształceń (i tym samym naprężeń), ale w większej skali, służyć może praca Allinson (1975). Wadą w znacznym stopniu ograniczającą zastosowanie tej metody jest konieczność wykonania preparatu z dwoma nałożonymi na siebie cienkimi kryształami. Obecnie możliwe jest uzyskanie bezpośrednich obrazów struktury atomowej. Numeryczne przetworzenie obrazu mikroskopowego umożliwia jednocześnie nałożenie dowolnej sieci odniesienia nie „w mikroskopie”, ale „w komputerze” i uzyskanie „sztucznych” prążków mory. Sposób taki został zaproponowany w pracy Hýtch i in. (1998) i zostanie przedstawiony w dalszej części tego rozdziału na przykładzie heterostruktury CdTe/ZnTe/GaAs oraz struktury GaN.

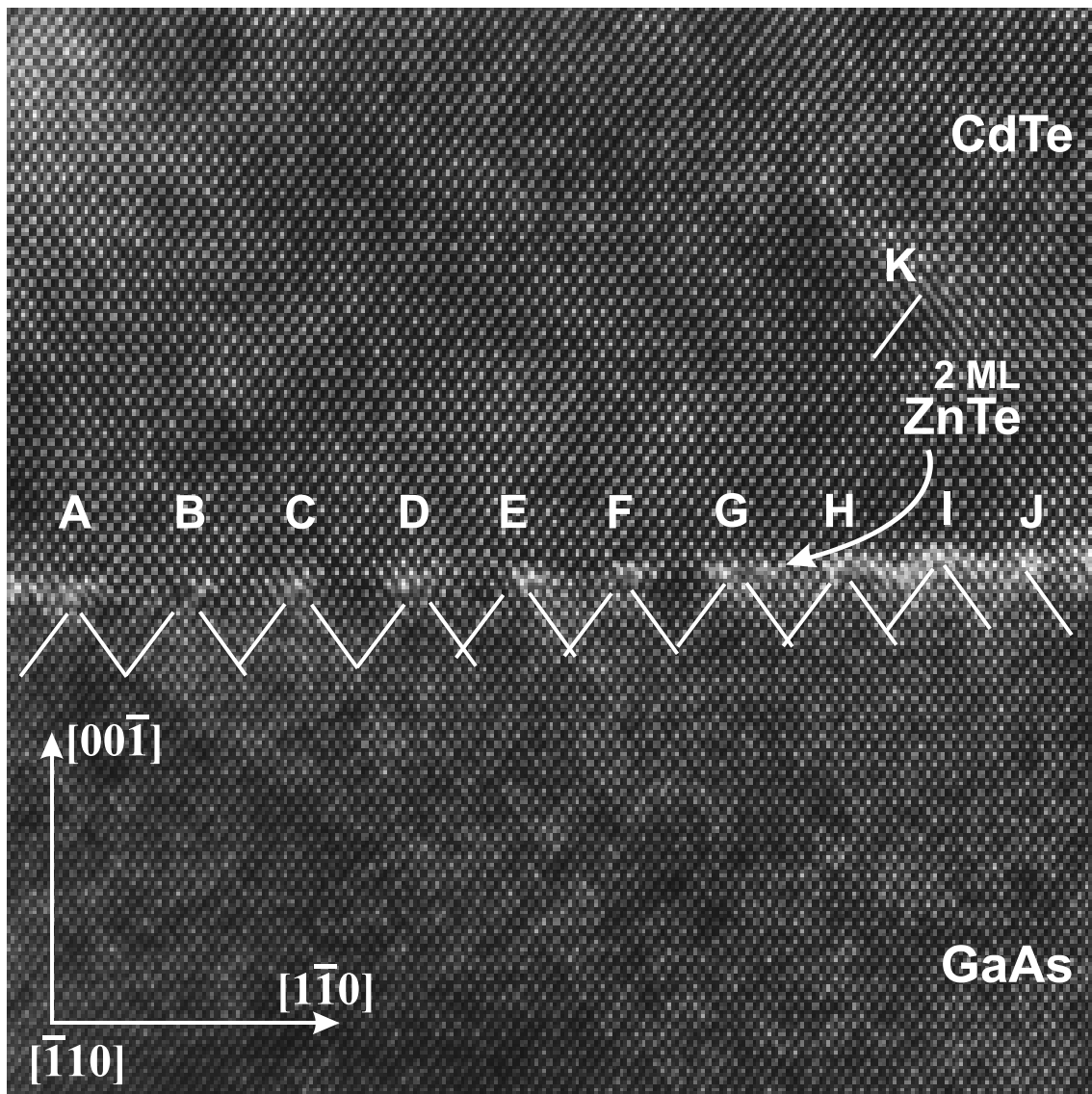
### 3.1 Obraz struktury

Epitaksję próbek wykonano w Laboratorium Wzrostu i Fizyki Niskowymiarowych Kryształów w Instytucie Fizyki PAN w Warszawie (S. Kret, G. Karczewski, J. Kossut). Obraz

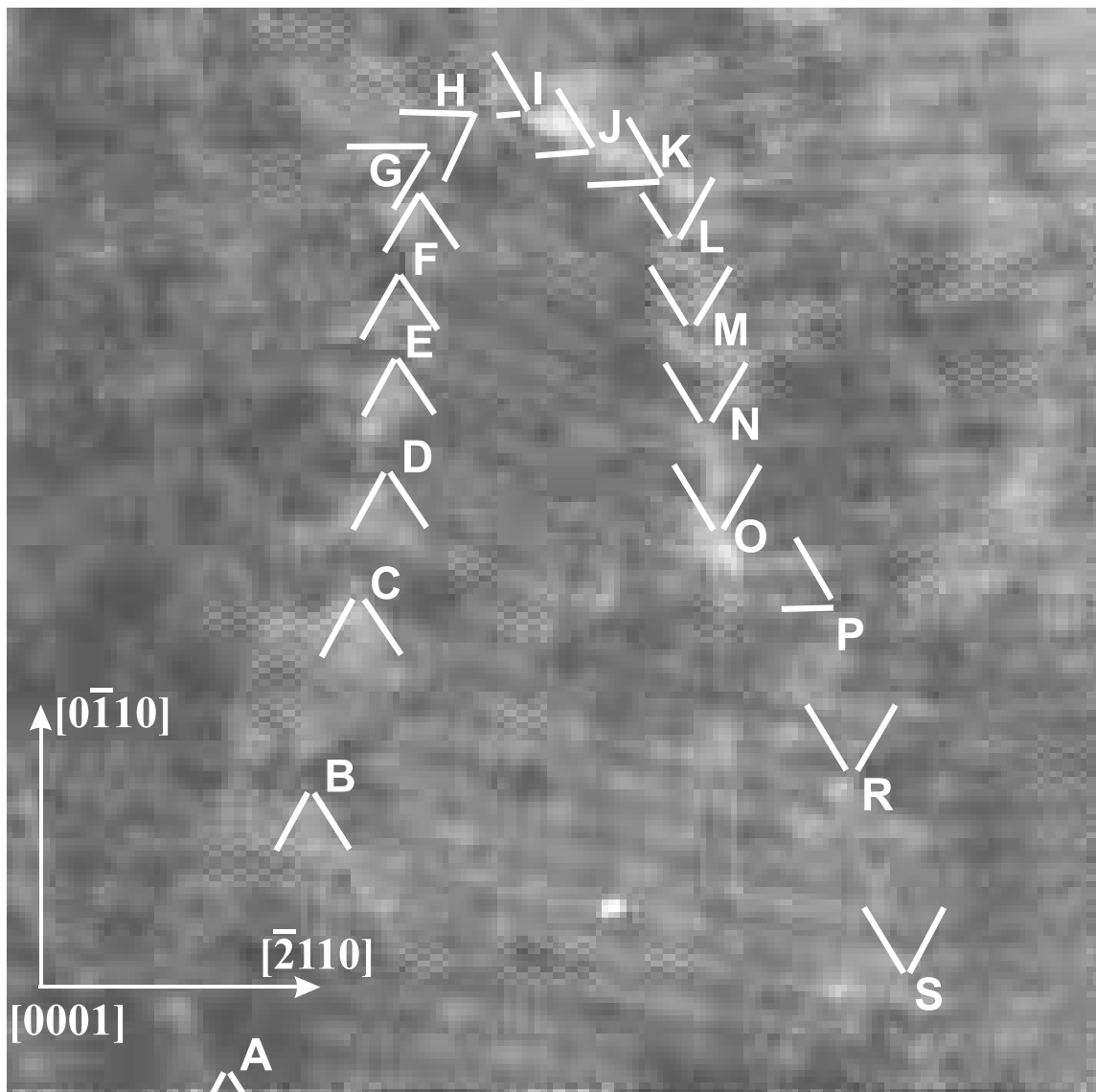
mikroskopowy próbki CdTe/ZnTe/GaAs został wykonany w laboratorium LPS-ESPCI w Paryżu (C. Delamare, S. Kret. oraz A. Dubone), natomiast próbki GaN w ESCTM-ISMRA w Caen (V. Potin, P. Ruterana oraz G. Nouet). Wyznaczenie pola dystorsji sieci obu analizowanych struktur wykonał Sławomir Kret.

Pomiar dystorsji sieci można podzielić na dwa etapy: wykonanie obrazu struktury za pomocą wysokorozdzielczego mikroskopowego elektronowego oraz, na jego podstawie, wyznaczenie pola dystorsji sieci za pomocą programów analizy obrazu. Wykonanie obrazu mikroskopowego obejmuje również przygotowanie próbki do pomiaru czyli m. in. wycinanie i polerowanie poprzez bombardowanie jonowe. Struktura CdTe/ZnTe/GaAs, którą przedstawiono na Rys. 3.1, została wykonana za pomocą epitaksji z wiązek molekularnych. Składniki umieszczone w osobnych pojemnikach podgrzano, a następnie poprzez otwieranie i zamykanie w odpowiednich chwilach poszczególnych pojemników uwalniano ich zawartość do obszaru nad próbką. Osadzanie poszczególnych pierwiastków na płaszczyźnie wzrostu kryształu powoduje wzrost struktury. W zależności od warunków, w jakich następuje wzrost, oraz od składników biorących udział w reakcji, rozróżnia się kilka sposobów wzrostu. Za najbardziej podstawowe uznaje się wzrosty: warstwa po warstwie (Frank-Van der Merwe), wyspowy (Volmer-Weber) i pośredni (Stranski-Krastanov). Inne typy wzrostów, takie jak wzrost kolumnowy, obróconych wysp, czy schodkowy są znacznie rzadziej obserwowane (zob. przegląd Scheel, 2000). Metoda epitaksji z wiązek molekularnych umożliwia kontrolowany wzrost poszczególnych składników i uznawana jest za bardzo dokładną (Żmija, 1988). W przypadku rozważanych w niniejszej pracy struktur wzrost następował odpowiednio warstwa po warstwie - CdTe/ZnTe/GaAs oraz wyspowo - GaN.

Na Rys. 3.1 przedstawiono strukturę CdTe/ZnTe/GaAs – jedną z dwóch analizowanych w niniejszej pracy. Ze względu na dużą różnicę stałych sieciowych kryształów CdTe oraz GaAs (14.6%), do połączenia tych kryształów zastosowano cienką warstwę nukleacyjną z trzeciego związku, tj. ZnTe. Wzrost następował w temperaturze 350 °C. Podczas przygotowania powierzchni podłoża zastosowano małe jej pochylenie – ok. 2% w stosunku do kierunku krystalograficznego [001] kryształu arsenku galu. Uzyskano dzięki temu dezorientację sieci wzrastającego kryształu w stosunku do orientacji sieci kryształu podłoża. Jak podają Shiflet i Van der Merwe jest to dobrze znana technika służąca uzyskaniu próbek o mniejszej liczbie dyslokacji (Shiflet i Van der Merwe, 1991). Powoduje ona częściową kompensację niedopasowania sieci warstwy i podłoża. Działania takie pozwoliły uzyskać strukturę o bardzo wysokiej jakości, ponieważ całkowita długość wektora Burgersa równa jest niedopasowaniu sieciowemu na długości połączenia kryształów (oczywiście przy założeniu racjonalnej dokładności np. rzędu



Rysunek 3.1: Obraz mikroskopowy struktury CdTe/ZnTe/GaAs. Zakończenia płaszczyzn krystalograficznych oznaczono białymi odcinkami.



Rysunek 3.2: Obraz mikroskopowy struktury GaN. Zakończenia płaszczyzn krystalograficznych oznaczono białymi odcinkami.

0.1nm). Otrzymana próbka była bardzo wysokiej jakości, lepszą niż analogiczna, przedstawiona na Rys. 2 w pracy Bauer i in. (1993). Ponadto, omawiana struktura charakteryzuje się bardzo małą dezorientacją sieci krystalograficznej. Kontrastuje to ze strukturą CdTe/GaAs bez warstwy buforowej zamieszczoną w pracy Cheng i in. (1995). Struktura tam przedstawiona charakteryzuje się  $6^\circ$  dezorientacją sieci krystalograficznej kryształów łączonych.

Obraz przedstawiony na Rys. 3.1 uzyskano za pomocą mikroskopu Philips CM 20 UT o napięciu 200 kV i rozdzielczości 0.19 nm. Szczegółowy opis i wartości parametrów przyjętych do obserwacji zawiera praca Kret i in. (2000). Płaszczyzna obrazu jest prostopadła do kierunku  $(\bar{1}10)$ . Można tam wyodrębnić dyslokacje leżące na płaszczyźnie połączenia kryształów (oznaczone od A do J) oraz jedną, usytuowaną powyżej interfejsu. Wśród nich dyslokacjami krawędziowymi są dyslokacje od A do I, natomiast mieszanymi – dyslokacje J i K.

W algorytmie przygotowującym dane wejściowe do analizy metodą elementów skończonych zastosowano procedurę uśredniania dystorsji na zadanym obszarze. Procedura taka spowodowała zmniejszenie rozdzielczości pola dystorsji sieci wykorzystywanego do analizy numerycznej. Można więc powiedzieć, że pomiar dystorsji sieci na podstawie obrazu z wysokorozdzielczego mikroskopu elektronowego jest dla prezentowanej analizy zbyt dokładny. Dla lepszego zobrazowania dyslokacji zaznaczono je parami linii, które przedstawiają płaszczyzny sieci kryształu dochodzące do interfejsu. Dyslokacje krawędziowe w CdTe/ZnTe/GaAs mają linie dyslokacyjne o kierunku  $[\bar{1}\bar{1}0]$  oraz wektor Burgersa  $\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}0]$ . Natomiast dyslokacje  $60^\circ$ , z których powstały dyslokacje krawędziowe, mają wektor Burgersa  $\frac{1}{2}[011]$  lub  $\frac{1}{2}[10\bar{1}]$ . Rozkład  $60^\circ$  dyslokacji niedopasowania na składowe przedstawiono schematycznie na Rys. 1.5.

Struktura GaN przedstawiona na Rys. 3.2 została wykonana za pomocą metody MOCVD (ang. metal-organic chemical vapor deposition) w temperaturze powyżej  $600^\circ\text{C}$ , w ciśnieniu atmosferycznym. Podłożem był szafir, natomiast jako warstwa buforowa służyła warstwa azotku galu. Obserwowana struktura usytuowana jest stosunkowo wysoko nad podłożem szafiru, tj. około  $0.5\ \mu\text{m}$ . Dzięki temu zawiera znacznie mniejszą liczbę defektów w porównaniu do obszaru bliższego podłożu. Defekty te są również bardziej równomiernie rozmieszczone. Informacja o rozkładzie defektów i wywoływanych przez nie naprężeniach jest istotna ze względu na możliwość ich przemieszczania się w kierunku filmu. Na jej podstawie można wyznaczyć wpływ obecności dyslokacji na strukturę pasm przewodnictwa. Dyslokacje te mogą być również centrami rekombinacji promienistej, czyli obiektami wprowadzającymi dodatkowy poziom energetyczny w strefie wzbronionej pasm przewodnictwa. Mogą one tym samym wpływać na własności



elektroniczno-optyczne przyrządu końcowego - w tym przypadku lasera.

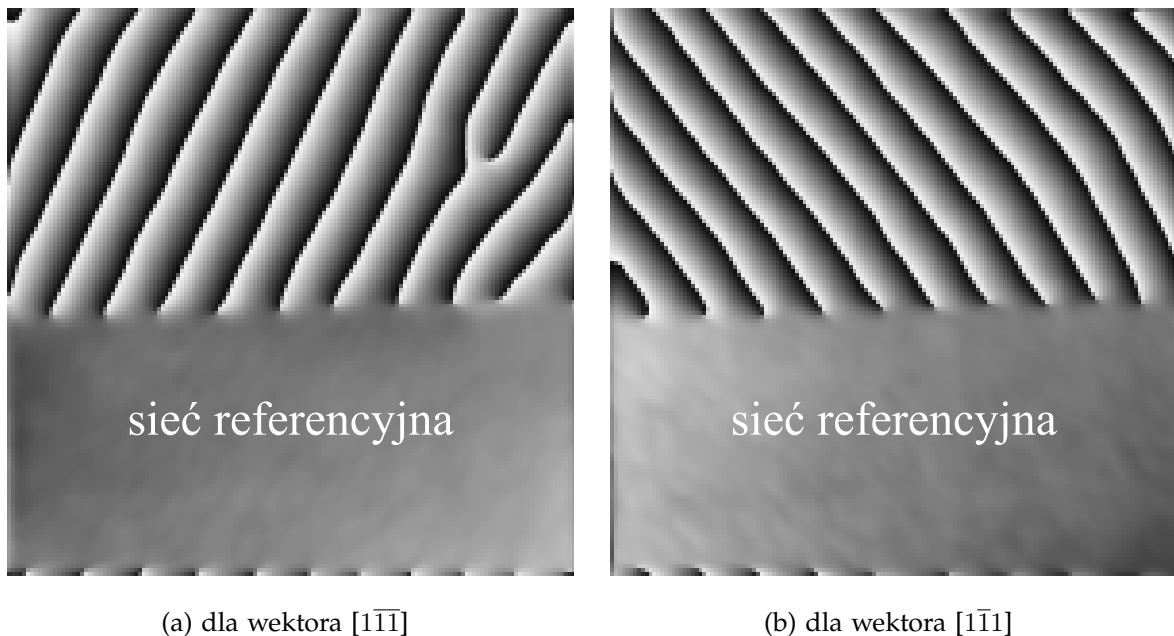
Dyslokacje widoczne na Rys. 3.2 powstały przez połączenie się dwu wzrastających wysp. Warunków technologicznych wzrostu nie można porównać z innymi z literatury, ponieważ informacje takie nie są publikowane ze względu na ich znaczenie komercyjne. W prezentowanej strukturze występują dyslokacje o liniach  $[0001]$  i wektorach Burgersa  $\frac{1}{3}[2\bar{1}\bar{1}0]$ . Kilka obrazów rdzeni dyslokacji z obu analizowanych w pracy struktur przedstawiono na Rys. 4.3 oraz 4.4. Interesujące może być porównanie ich z obrazami zamieszczonymi w pracy Bourret i in. (1982), gdzie przedstawiono rdzenie dyslokacji charakteryzujące się bardzo uporządkowanym rozkładem atomów. Struktura przedstawiona na Rys. 4.3 jest bardziej zróżnicowana. Wynika to m.in z obecności cynku w obszarach rdzeni dyslokacji. Natomiast rdzenie dyslokacji przedstawionych na Rys. 4.4 wykazują już znacznie mniejszą różnorodność.

## 3.2 Metoda fazy geometrycznej

Do wyznaczenia dystorsji sieci wykorzystano obrazy mikroskopowe struktur CdTe/-ZnTe/GaAs z Rys. 3.1 oraz GaN z Rys. 3.2. Zastosowano w tym celu metodę fazy geometrycznej, zaproponowaną w pracy Hýtch i in. (1998). Polega ona na wyznaczeniu odchylenia fazowego analizowanego obrazu struktury w odniesieniu do obrazu struktury w obszarze referencyjnym. W metodzie tej obraz mikroskopowy jest rozdzielany na prążki sieciowe, odpowiadające płaszczyznom sieciowym  $d(hkl)$ . W praktyce operacja ta przeprowadzana jest w przestrzeni Fouriera poprzez selekcję częstości przestrzennych w sąsiedztwie pików Bragowskich (refleksów sieciowych  $g(hkl)$  z zastosowaniem okrągłej maski selekcyjnej). Następnie, po wykonaniu transformaty odwrotnej, w odniesieniu do wybranej referencyjnej stałej sieciowej, analizuje się zmianę odległości między prążkami  $d(hkl)(x,y)$ . W klasycznej metodzie mory dokonuje się pomiarów odległości pomiędzy prążkami interferencyjnymi pojawiającymi się w miejscach, gdzie mierzone przemieszczenie przekracza okres referencyjny  $2\pi$ . Przy zastosowaniu metody fazy geometrycznej rozdzielczość zależy od ilości punktów pomiarowych przypadających na jeden prążek sieciowy. Zarys tej metody zostanie przedstawiony poniżej na podstawie pracy Snoeck i in. (1998). W przypadku jednowymiarowym zbiór periodycznych punktów, które są obrazami atomów, można opisać przez funkcję

$$P(x) = A \cos(2\pi g_0 x + \phi(x)), \quad (3.1)$$

gdzie przez  $A, g_0, x, \phi(x)$  oznaczono kolejno amplitudę, fazę, odległość w danym układzie współrzędnych oraz odchylenie fazowe. Dla nie zaburzonej sieci krystalicznej odległości pomiędzy atomami są takie same jak w sieci referencyjnej, stąd otrzymujemy



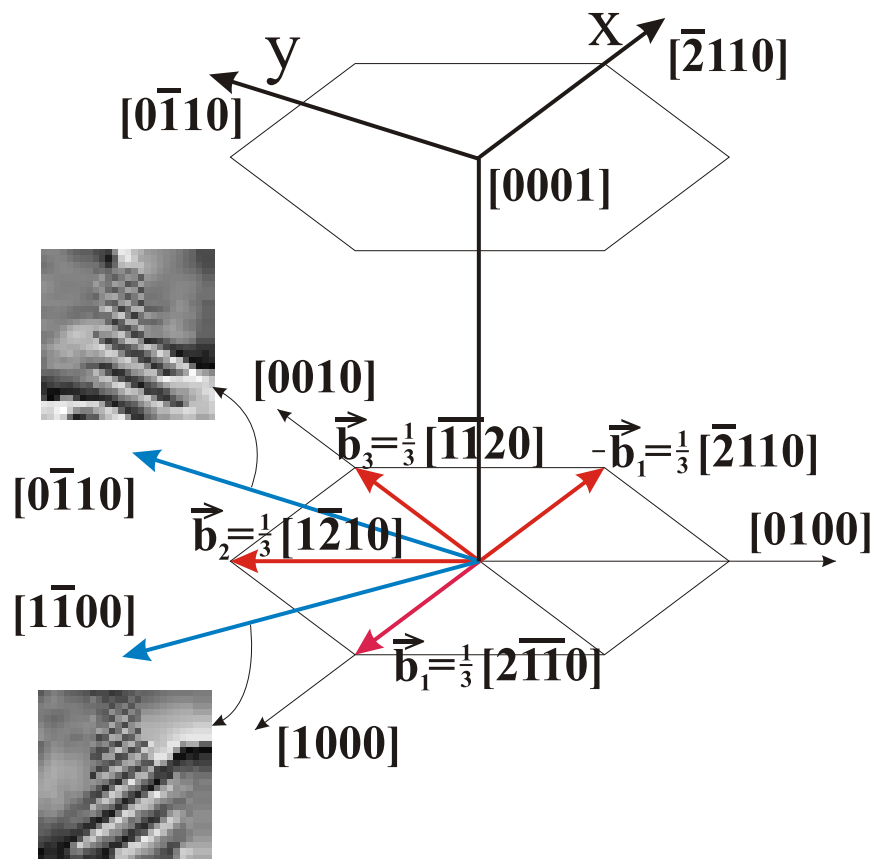
Rysunek 3.3: Obraz fazowy dla heterostruktury CdTe/ZnTe/GaAs przedstawionej na Rys. 3.1.

$\phi(x) = 0$ . Dla sieci kryształu zawierającej zaburzenia, wartość  $\phi(x)$  jest miarą odchylenia atomów od ich pozycji w sieci idealnej. Przyjmując, że odchylenie fazowe spełnia zależność  $\phi(x) = -2\pi g_0 u(x)$ , można określić przemieszczenie atomów z ich początkowych, sieciowo doskonałych pozycji jako  $u(x) = -\phi(x)/2\pi g_0$ . Następnie, przez zróżniczkowanie funkcji  $u(x)$  po współrzędnej przestrzennej otrzymuje się dystorsje w rozpatrywanej sieci krystalicznej. W przypadku jednowymiarowym możliwe są różnice w obrazie fazowym jedynie dla jednej osi układu współrzędnych, więc dystorsje opisują zaburzenia sieci krystalicznej tylko w jednym kierunku.

Postępując analogicznie dla przypadku dwuwymiarowego wybiera się dwa niekolinearne wektory  $g_1, g_2$ . Dla wektora  $g_i$  ( $i = 1, 2$ ) otrzymuje się wtedy następującą postać funkcji przesunięcia fazowego

$$\phi(x, y)_{g_i} = -2\pi [g_{ix}u_x(x, y) + g_{iy}u_y(x, y)], \quad (3.2)$$

gdzie  $g_{ix}, g_{iy}$  są składowymi wektora  $g_i$  w kierunkach osi  $x$  oraz  $y$ , natomiast  $u_x(x, y)$  oraz  $u_y(x, y)$  są odpowiednimi składowymi wektora przemieszczeń w punkcie o współrzędnych  $(x, y)$ . Wektory  $g_i$  najwygodniej jest wybrać zgodnie z orientacją sieci krystalograficznej. Przedstawione na Rys. 3.3 przesunięcia fazowe odpowiadają heterostrukturze przedstawionej na Rys. 3.1. Kierunki linii na Rys. 3.3 oraz Rys. 3.5 są kierunkami prostopadłymi do wektorów  $g_i$ . Linie takie oznaczają, że w ich miejscu występują dodatkowe płaszczyzny atomowe (lub występuje tam brak płaszczyzny atomowej) w stosunku do



Rysunek 3.4: Schemat orientacji kryształu azotku galu wraz z osiami pomiarów przesunięcia fazowego.

sieci referencyjnej (GaAs dla obrazu z Rys. 3.1 oraz GaN dla obrazu z Rys. 3.2). Przemieszczenia, na podstawie równania (3.2), opisane są zależnościami

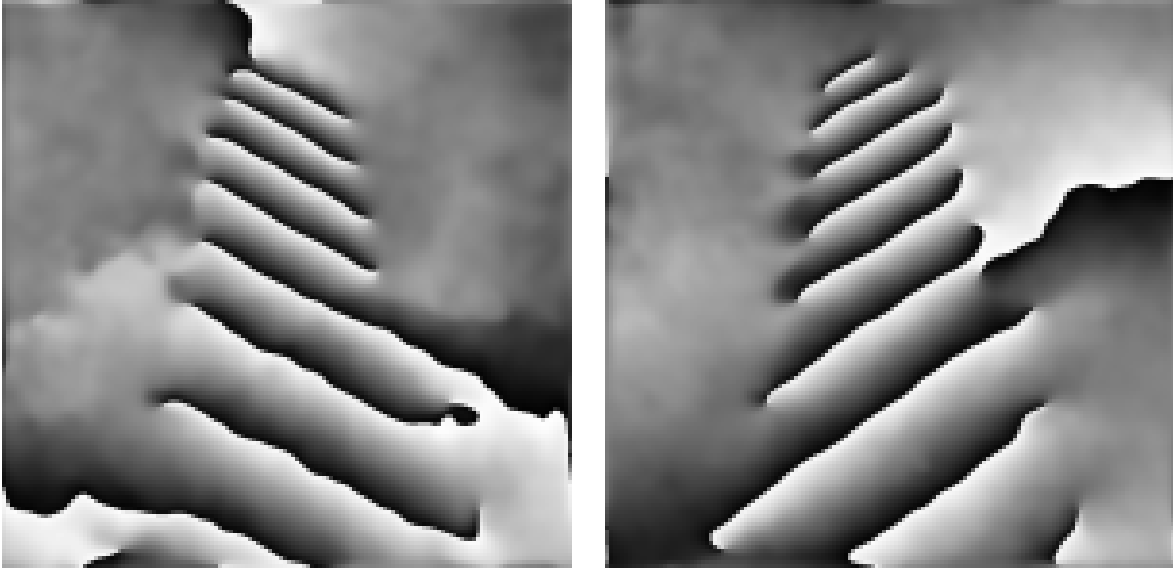
$$u_x(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \left[ \frac{\phi(x, y)_{g_1} g_{2y} - \phi(x, y)_{g_2} g_{1y}}{g_{1x} g_{2y} - g_{1y} g_{2x}} \right], \quad (3.3)$$

$$u_y(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \left[ \frac{\phi(x, y)_{g_2} g_{1x} - \phi(x, y)_{g_1} g_{2x}}{g_{1x} g_{2y} - g_{1y} g_{2x}} \right]. \quad (3.4)$$

Dystorsje wyznacza się na podstawie następujących wzorów

$$\beta_{xx}(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \left[ \frac{\frac{\partial}{\partial x} \phi(x, y)_{g_1} g_{2y} - \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, y)_{g_2} g_{1y}}{g_{1x} g_{2y} - g_{1y} g_{2x}} \right], \quad (3.5)$$

$$\beta_{xy}(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \left[ \frac{\frac{\partial}{\partial y} \phi(x, y)_{g_1} g_{2y} - \frac{\partial}{\partial y} \phi(x, y)_{g_2} g_{1y}}{g_{1x} g_{2y} - g_{1y} g_{2x}} \right], \quad (3.6)$$

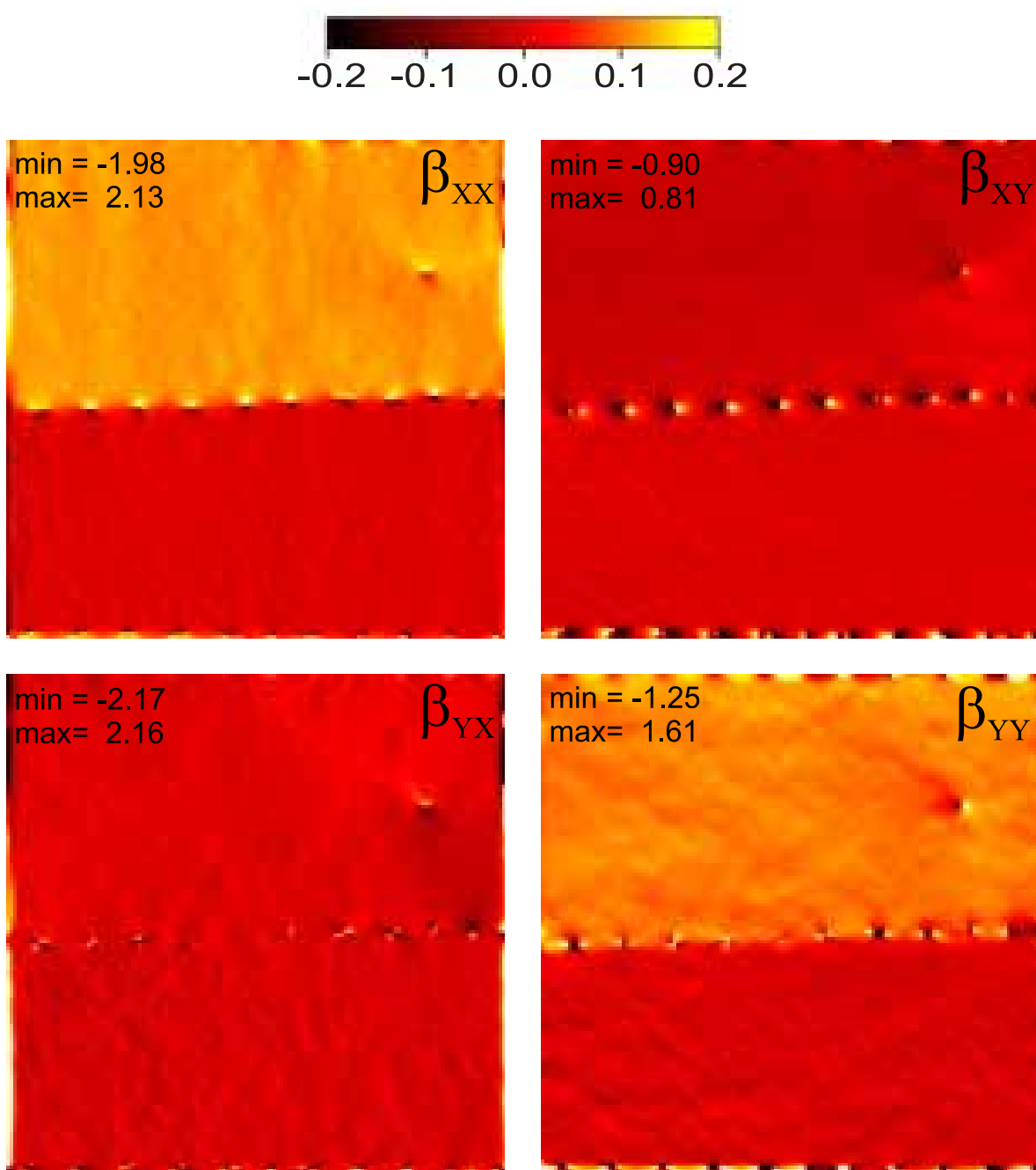
(a) dla wektora  $[0\bar{1}10]$ (b) dla wektora  $[1\bar{1}00]$ 

Rysunek 3.5: Obraz fazowy dla struktury GaN przedstawionej na Rys. 3.2.

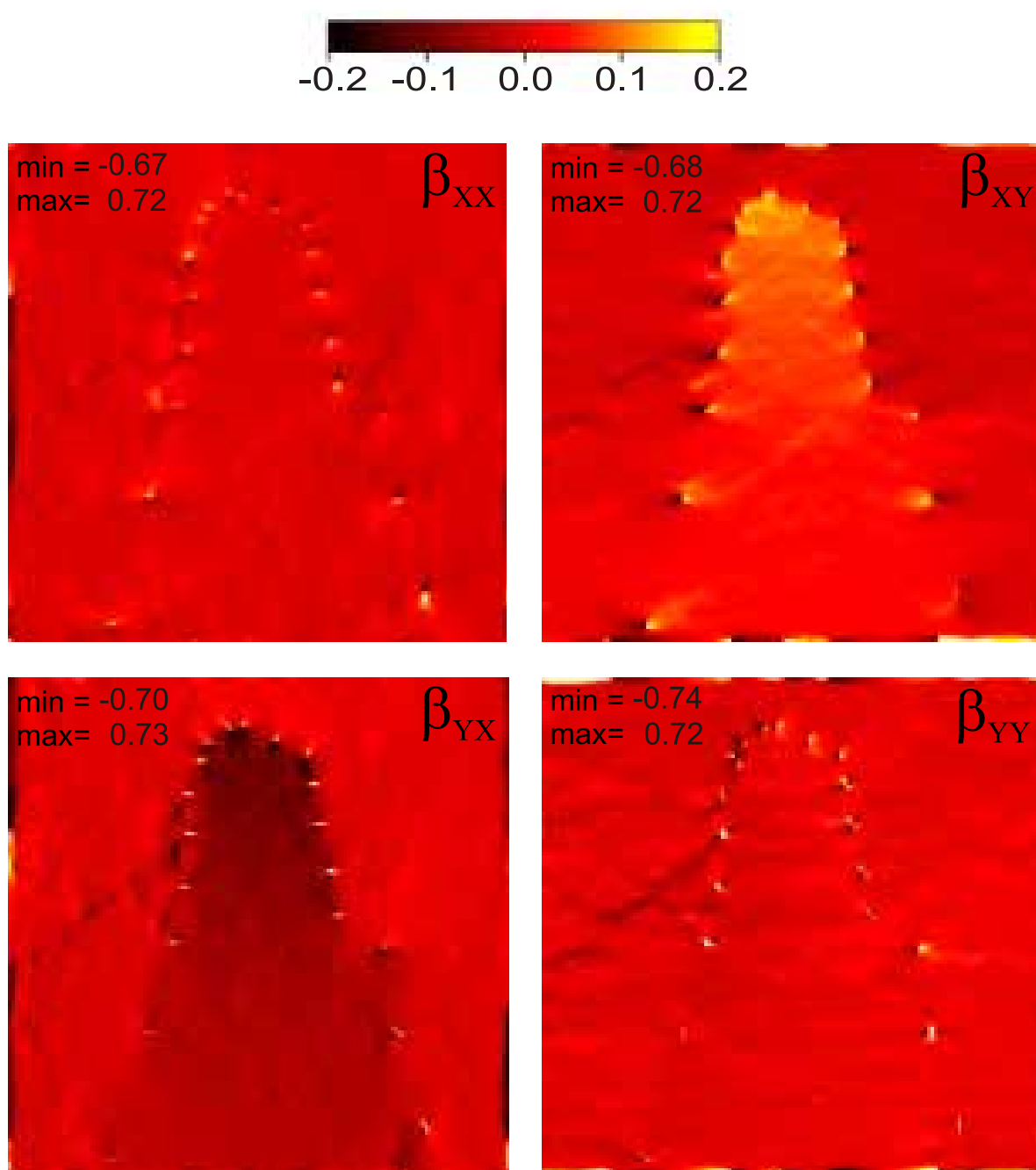
$$\beta_{yx}(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \left[ \frac{\frac{\partial}{\partial x} \phi(x, y)_{g_2} g_{1x} - \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, y)_{g_1} g_{2x}}{g_{1x} g_{2y} - g_{1y} g_{2x}} \right], \quad (3.7)$$

$$\beta_{yy}(x, y) = -\frac{1}{2\pi} \left[ \frac{\frac{\partial}{\partial y} \phi(x, y)_{g_2} g_{1x} - \frac{\partial}{\partial y} \phi(x, y)_{g_1} g_{2x}}{g_{1x} g_{2y} - g_{1y} g_{2x}} \right]. \quad (3.8)$$

W wyniku zastosowania wzorów (3.5)÷(3.8) powstają również pola nieciągłości dystorsji w postaci bardzo cienkich linii. Odpowiadają one miejscom gwałtownego przejścia obrazu fazowego od wartości  $-\pi$  do wartości  $\pi$ . Nieciągłości te są usuwane poprzez ich wygładzenie. Wygładzenie to należy traktować jako element korekcyjny całego procesu wyznaczania dystorsji sieci. Istnienie tych nieciągłości nie wnosi do otrzymanych wyników błędów, które należałoby ująć w bardziej rygorystyczny sposób. Otrzymane składowe pola dystorsji sieci  $\beta$  dla obu analizowanych w pracy struktur zostały przedstawione odpowiednio na Rys. 3.6 oraz Rys. 3.7. Zaburzenia powstałe na brzegach spowodowane są używaniem transformaty Fouriera, w której zakładana jest periodyczność obrazu. Poprzez transformatę Fouriera łączy się brzegi obrazu mikroskopowego: prawy z lewym oraz dolny z górnym. Stąd, zaburzenia na brzegach wynikają z niezgodności sieci na skrajnych częściach obrazu mikroskopowego. Dystorsje poza obszarem połączenia kryształów można uznać za niewiele odbiegające od stanu jednorodnego. Dla części górnej heterostruktury CdTe/ZnTe/GaAs, czyli obszaru zajmowanego przez CdTe odpowiadają one różnicy stałych sieciowych kryształów CdTe i GaAs, tj.  $\beta_{xx} \simeq 14.6\%$ ;  $\beta_{yy} \simeq 14.6\%$ . Dystorsje  $\beta$  mogą więc być różne od zera nawet dla kryształu



Rysunek 3.6: Pole dystorsji sieci  $\beta$  w heterostrukturze CdTe/ZnTe/GaAs wyznaczone metodą fazy geometrycznej. Wartości ekstremalne są zlokalizowane w rdzeniach dyslokacji. Wszystkie składowe tensora dystorsji zostały wyznaczone w odniesieniu do niezdeformowanej sieci arsenku galu.



Rysunek 3.7: Pole dystorsji sieci  $\beta$  w strukturze GaN wyznaczone metodą fazy geometrycznej. Wartości ekstremalne są zlokalizowane w rdzeniach dyslokacji.

Wszystkie składowe tensora dystorsji zostały wyznaczone w odniesieniu do niezdeformowanej sieci azotku galu.

o sieci krystalograficznej wolnej od defektów. Tak wyznaczone pole dystorsji sieci jest funkcją składu chemicznego poszczególnych kryształów w odniesieniu do sieci referencyjnej, a nie tylko odchyłeń atomów od ich pozycji w idealnej sieci krystalograficznej. Z tego powodu, aby wyznaczyć pole dystorsji sieci wynikające tylko z deformacji, na wyznaczone już pole dystorsji sieci trzeba nałożyć dodatkowe. Powinno ono zniwelować wpływ składu chemicznego heterostruktury na wartości dystorsji uzyskanych z pomiarów. Ze względu na to, że pole to jest funkcją rozkładu przestrzennego poszczególnych składników heterostruktury w niniejszej pracy nazwane zostało polem dystorsji chemicznej. Przedstawiona metoda pomiaru dystorsji wymaga zachowania jednorodnej grubości próbki. Zmiana grubości może prowadzić do dużych zaburzeń pomiaru dystorsji (Snoeck i in., 1998). Szczegółowy opis przedstawionej powyżej procedury wyznaczania dystorsji sieci można znaleźć w pracach: Hýtch i in. (1998); Snoeck i in. (1998); Kret i in. (1998, 2001).

Opisana metoda wyznaczania dystorsji uważana jest obecnie za znacznie lepszą od innych, używanych w analizie dyslokacji na podstawie obrazów z wysokorozdzielczych mikroskopów elektronowych.

# Rozdział 4

## Proponowana metoda wyznaczania naprężeń

Proponowaną metodę wyznaczenia naprężeń w heterostrukturach opracowano wykorzystując nieliniową mechanikę ośrodków ciągłych, teorię dyslokacji oraz metodę elementów skończonych. Dla jej przedstawienia wybrano strukturę CdTe/ZnTe/GaAs, która, ze względu na swój zróżnicowany skład chemiczny, jest bardziej złożona w opisie od drugiej analizowanej struktury czyli struktury GaN.

### 4.1 Kinematyka ośrodka z dyslokacjami

#### 4.1.1 Rozkład gradientu deformacji

Rozważmy otwarty podzbiór  $\mathcal{B}$  trójwymiarowej przestrzeni Euklidesowej  $\mathcal{E}^3$ . Punkty zawarte w  $\mathcal{B}$  nazywane są punktami materialnymi. Za pomocą jednoparametrowej rodziny atlasów  $\mathbf{x}_t : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{E}^3$  można określić przekształcenie punktów  $\mathbf{X} \in \mathcal{B}$  na punkty  $\mathbf{x} \in \mathcal{E}^3$

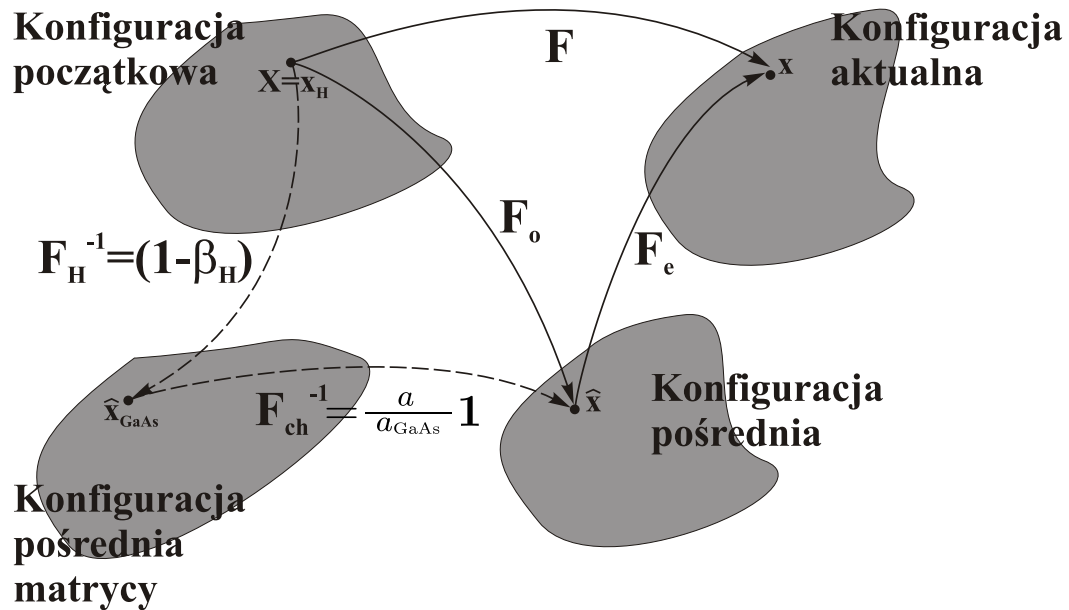
$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t). \quad (4.1)$$

Założono różniczkowalność funkcji  $\mathbf{x}(\cdot, \cdot)$  w stopniu, jaki będzie dalej potrzebny w opisie. Funkcją odwrotną do (4.1) jest funkcja

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t). \quad (4.2)$$

W zależności od czasu  $t$  wygodnie jest wyróżnić dwie konfiguracje: początkową – Lagrange’a  $\mathbf{x}(\mathbf{X}, 0)$  oraz końcową (aktualną) – Eulera  $\mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ . Oprócz konfiguracji początkowej i aktualnej wprowadzono do opisu konfigurację pośrednią tj. konfigurację odciążoną, w której ciało jest lokalnie w stanie beznaprężeniowym. Jeśli miary deformacji odnoszone są do konfiguracji początkowej (aktualnej) to opis nazywany jest opisem Lagrange’a (Eulera).





Rysunek 4.1: Schemat rozważnych konfiguracji.

W globalnym, kartezjańskim układzie współrzędnych  $\mathbf{Z}$  każdemu punktowi  $\mathbf{X}$  w konfiguracji początkowej przypisany jest jego wektor wodzący

$$\mathbf{R}_X = R^I \mathbf{Z}_I, \quad (4.3)$$

gdzie  $R^I = \{R^1, R^2, R^3\}$  są współrzędnymi punktu, natomiast  $I$  jest indeksem osi kartezjańskiego układu współrzędnych z bazą  $\mathbf{Z}_I$ . Położenie punktu  $x$  w konfiguracji aktualnej można analogicznie określić za pomocą jego wektora wodzącego

$$\mathbf{r}_x = r^i \mathbf{Z}_i, \quad (4.4)$$

gdzie  $r^i = \{r^1, r^2, r^3\}$  są współrzędnymi w tej samej bazie  $\mathbf{Z}_i$ . Można także stosować odrębne kartezjańskie układy współrzędnych dla ciała w konfiguracjach początkowej i aktualnej (zob. np. Gairola, 1979). Są one związane ze sobą wektorem przesunięcia środka układu współrzędnych i obrotem osi współrzędnych. Lokalnie określono także krzywoliniowe układy współrzędnych w konfiguracji początkowej (z bazą  $\mathbf{E}^K$ ) i w konfiguracji aktualnej (z bazą  $\mathbf{e}^k$ ). W dalszej części pracy stosowane będą następujące oznaczenia:

wielkość w konfiguracji:	początkowej	odciążonej	aktualnej
współrzędne położenia cząstki	$\mathbf{X}$	$\hat{\mathbf{x}}$	$\mathbf{x}$
operator gradientu pola	GRAD		grad
operator wirowości pola	CURL		curl
operator dywergencji pola	DIV		div
dowolna zmienna (*)	$\overline{(*)}$	$\widehat{(*)}$	$(*)$

Operatory gradientu, wirowości i dywergencji w konfiguracji aktualnej mają następujące definicje

$$\text{grad } \mathbf{T} \stackrel{df}{=} \mathbf{T}_{,k} \otimes \mathbf{e}^k, \quad (4.5)$$

$$\text{curl } \mathbf{T} \stackrel{df}{=} \mathbf{T}_{,k} \times \mathbf{e}^k, \quad (4.6)$$

$$\text{div } \mathbf{T} \stackrel{df}{=} \mathbf{T}_{,k} \cdot \mathbf{e}^k, \quad (4.7)$$

gdzie  $\otimes$ ,  $\times$ ,  $\cdot$  oznaczają odpowiednio iloczyn diadowy, wektorowy i skalarny. Pochodna kowariantna zdefiniowana jest następująco

$$\mathbf{T}_{,k} \stackrel{df}{=} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial x^k}. \quad (4.8)$$

W przypadku tensora drugiego rzędu, na podstawie powyższej definicji, można napisać

$$\mathbf{T}_{,k} = \frac{\partial (T_{ij} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j)}{\partial x^k} = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x^k} \mathbf{e}^i \otimes \mathbf{e}^j + T_{ij} \frac{\partial \mathbf{e}^i}{\partial x^k} \otimes \mathbf{e}^j + T_{ij} \mathbf{e}^i \otimes \frac{\partial \mathbf{e}^j}{\partial x^k}. \quad (4.9)$$

W konfiguracji początkowej, analogicznie jak w konfiguracji aktualnej, zdefiniowano operatory

$$\text{GRAD } \mathbf{T} \stackrel{df}{=} \mathbf{T}_{,K} \otimes \mathbf{E}^K, \quad (4.10)$$

$$\text{CURL } \mathbf{T} \stackrel{df}{=} \mathbf{T}_{,K} \times \mathbf{E}^K, \quad (4.11)$$

$$\text{DIV } \mathbf{T} \stackrel{df}{=} \mathbf{T}_{,K} \cdot \mathbf{E}^K, \quad (4.12)$$

przy czym

$$\mathbf{T}_{,K} \stackrel{df}{=} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial X^K}. \quad (4.13)$$

W konfiguracji odciążonej na ogół nie można zdefiniować operatorów pola, gdyż nie zawsze można w niej zdefiniować globalnego układu współrzędnych. Można jednak

do tej konfiguracji odnieść operatory pola zdefiniowane w konfiguracjach początkowej i aktualnej. Gradient deformacji zdefiniowany jest <sup>(1)</sup> jako

$$\mathbf{F} \stackrel{df}{=} \text{GRAD } \mathbf{x} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}}, \quad (4.14)$$

więc jego odwrotność ma postać

$$\mathbf{F}^{-1} \stackrel{df}{=} \text{grad } \mathbf{X} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}}. \quad (4.15)$$

Korzystając z wprowadzonych tensorów gradientu deformacji (4.14) i (4.15) warto podać zależności pomiędzy operatorami pola w konfiguracjach początkowej (4.10) – (4.12) i aktualnej (4.5) – (4.7). Operatory te związane są ze sobą następującymi relacjami

$$\text{GRAD } \mathbf{T} = \text{grad } \mathbf{T} \mathbf{F}, \quad (4.16)$$

$$\text{CURL } \mathbf{T} = \text{curl} (\mathbf{T} \mathbf{F}^{-1}) \mathbf{F}^{-T} \det \mathbf{F}, \quad (4.17)$$

$$\text{DIV } \mathbf{T} = \text{div} (\mathbf{T} \mathbf{F}^T \det \mathbf{F}^{-1}) \det \mathbf{F}. \quad (4.18)$$

Wektor przemieszczenia, określony jako różnica wektorów położeń cząstki materialnej z konfiguracji aktualnej i początkowej, można przedstawić jako

$$\mathbf{u} = \mathbf{r}_x - \mathbf{R}_{X(x)}. \quad (4.19)$$

Gradient przemieszczenia odpowiednio w konfiguracji początkowej i aktualnej, na podstawie powyższych zależności, wyrazić można poprzez gradienty deformacji (4.14) i (4.15) następująco

$$\text{GRAD } \mathbf{u}(\mathbf{X}) = \frac{\partial (\mathbf{x}(\mathbf{X}) - \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{x}(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} - \mathbf{1} = \mathbf{F} - \mathbf{1}, \quad (4.20)$$

$$\text{grad } \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \frac{\partial (\mathbf{x} - \mathbf{X}(\mathbf{x}))}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{1} - \frac{\partial \mathbf{X}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{1} - \mathbf{F}^{-1}, \quad (4.21)$$

natomiast zmiana objętości określona w konfiguracji odniesienia

$$\frac{dv}{dV} = \det \mathbf{F}. \quad (4.22)$$

W celu wyznaczenia dystorsji sieci na podstawie obrazu z wysokorozdzielczego mikroskopu elektronowego (zob. Rys. 3.1) jako sieć referencyjną wybiera się niezaburzony obszar jednego ze składników. Obszar ten powinien być na tyle odległy od interfejsu, by był on w stanie beznaprężeniowym. W celu uzyskania jednoznacznych pomiarów dystorsji sieci, dla całej heterostruktury przyjęto jedną sieć referencyjną. W przypadku

<sup>1</sup>w zapisie indeksowym  $F^i_I = \frac{\partial x^i}{\partial X^I}$

struktury CdTe/ZnTe/GaAs jako sieć referencyjną przyjęto sieć kryształu arsenku galu. Przykładając sieć referencyjną (zwaną maską) do każdego z punktów obrazu mikroskopowego można wyznaczyć dystorsje sieci w każdym z punktów widocznych na obrazie. Dystorsje wyznacza się z zależności

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{\partial(\mathbf{x}_H - \hat{\mathbf{x}})}{\partial \mathbf{x}_H}, \quad (4.23)$$

gdzie  $\mathbf{x}_H, \hat{\mathbf{x}}$  oznaczają odpowiednio współrzędne położenia punktu na obrazie mikroskopowym oraz współrzędne położenia punktu na przykładanej masce (zob. Rys. 4.1). Wykorzystując zależność  $\mathbf{u}_H = \mathbf{x}_H - \hat{\mathbf{x}}$ , wzór (4.23) można zapisać również w sposób następujący

$$\boldsymbol{\beta} = \frac{\partial \mathbf{u}_H}{\partial \mathbf{x}_H}. \quad (4.24)$$

Ze wzorów (4.23) i (4.24) wynika, że wartości wyznaczonych dystorsji sieci istotnie zależą od rozmiaru sieci matrycy. Jeśli jako sieć referencyjna wybrany zostanie obszar, w którym występują naprężenia residualne, to uzyskane zostaną dystorsje względne. Opis kontynualny służący do wyznaczenia naprężeń na podstawie pola dystorsji sieci musi uwzględniać różnicę pomiędzy stałymi sieci poszczególnych kryształów składowych a stałą sieci referencyjnej. Tą część dystorsji sieci można łatwo wyodrębnić pod warunkiem, że rozkład przestrzenny składników heterostruktury zostanie prawidłowo wyznaczony. Dla uwzględnienia tej części dystorsji wprowadzono do opisu następującą konfigurację. Jako **konfigurację początkową** przyjęto konfigurację odpowiadającą obrazowi z mikroskopu elektronowego (Rys. 3.1); jako **konfigurację pośrednią matrycy** (zob. Rys. 4.1) przyjęto konfigurację, w której stałe sieci kryształów składowych są równe stałym sieci kryształu siatki referencyjnej (w przypadku struktury z Rys. 3.1 – GaAs). Konfiguracja, w której całe ciało jest lokalnie w swoim naturalnym, beznaprężeniowym stanie nazywano **konfiguracją pośrednią**. Każda komórka elementarna sieci krystalograficznej ma w tej konfiguracji swój wymiar naturalny, tj. w przypadku ZnTe jest to idealna sieć ZnTe o rozmiarze sieci krystalograficznej równym wartości stabilizowanej. Wprowadzenie deformacji przeprowadzającej ciało z konfiguracji pośredniej matrycy do konfiguracji pośredniej wymuszone jest sposobem pomiaru dystorsji sieci. Gradient deformacji wstępnej  $\mathbf{F}_H$ , transformującej idealną sieć matrycy (GaAs) w punkcie  $\hat{\mathbf{x}}$  w

zdeformowaną sieć heterostruktury w punkcie  $\mathbf{x}_H$ , opisano następująco

$$\begin{aligned}
 \mathbf{F}_H &= \frac{\partial \mathbf{x}_H}{\partial \hat{\mathbf{x}}} = \left( \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{x}_H} \right)^{-1} \\
 &= \left( \frac{\partial (\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{x}_H - \mathbf{x}_H)}{\partial \mathbf{x}_H} \right)^{-1} = \left( \mathbf{1} - \frac{\partial (\mathbf{x}_H - \hat{\mathbf{x}})}{\partial \mathbf{x}_H} \right)^{-1} \\
 &= \left( \mathbf{1} - \frac{\partial (\mathbf{x}_H - \hat{\mathbf{x}})}{\partial \mathbf{x}_H} \right)^{-1} = \left( \mathbf{1} - \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial \mathbf{x}_H} \right)^{-1} \\
 &= [\mathbf{1} - \boldsymbol{\beta}_H]^{-1}.
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Oznaczenie tej deformacji indeksem  $_H$  odnosi się do faktu, że jest ona wyznaczana na podstawie obrazu mikroskopowego HRTEM (ang. high resolution transmission electron microscopy). Deformacja transformująca ciało z konfiguracji pośredniej do konfiguracji pośredniej matrycy zależy od przestrzennego rozkładu składników. Stąd, nazwano ją deformacją chemiczną. Dla punktu  $\mathbf{x}_H$  występują trzy przypadki <sup>(2)</sup>

$$\mathbf{F}_{ch} = \frac{\hat{a}_{GaAs}}{\hat{a}_{GaAs}} \mathbf{1} = \frac{0.56530 \text{ nm}}{0.56530 \text{ nm}} \mathbf{1} = 1,0000 \cdot \mathbf{1} \quad \text{dla } \mathbf{x}_H \in \text{GaAs}, \tag{4.26}$$

$$\mathbf{F}_{ch} = \frac{\hat{a}_{GaAs}}{\hat{a}_{ZnTe}} \mathbf{1} = \frac{0.56530 \text{ nm}}{0.61034 \text{ nm}} \mathbf{1} = 0,9262 \cdot \mathbf{1} \quad \text{dla } \mathbf{x}_H \in \text{ZnTe}, \tag{4.27}$$

$$\mathbf{F}_{ch} = \frac{\hat{a}_{GaAs}}{\hat{a}_{CdTe}} \mathbf{1} = \frac{0.56530 \text{ nm}}{0.64800 \text{ nm}} \mathbf{1} = 0,8724 \cdot \mathbf{1} \quad \text{dla } \mathbf{x}_H \in \text{CdTe}, \tag{4.28}$$

gdzie  $\hat{a}_{(\cdot)}$  oznaczają rozmiary sieci poszczególnych kryształów. Nasuwając na siebie (mnożąc) oba powyższe tensory deformacji  $\mathbf{F}_H$  i  $\mathbf{F}_{ch}$  otrzymano tensor deformacji transformującej ciało z konfiguracji pośredniej do konfiguracji początkowej (odpowiadającej obrazowi mikroskopowemu z Rys. 3.1). Deformacja odwrotna do tej ostatniej jest (w przedstawionym sformułowaniu) deformacją wstępną  $\mathbf{F}_\circ$  i transformuje ona ciało z konfiguracji początkowej, której odpowiada obraz mikroskopowy, do konfiguracji pośredniej, odpowiadającej ciału bez naprężeń <sup>(3)</sup>

$$\mathbf{F}_\circ = \mathbf{F}_{ch}^{-1} \mathbf{F}_H^{-1}. \tag{4.29}$$

Po deformacji wstępnej  $\mathbf{F}_\circ$  następuje odciążenie poprzez deformację sprężystą  $\mathbf{F}_e$ . Gradient deformacji całkowitej przyjęto więc jako

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_{ch}^{-1} \mathbf{F}_H^{-1} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_\circ. \tag{4.30}$$

<sup>2</sup>W jednoskładnikowej strukturze GaN zachodzi tylko deformacja tożsamościowa, tak jak dla składnika GaAs w przypadku struktury CdTe/ZnTe/GaAs, wzór (4.26).

<sup>3</sup>W rzeczywistej strukturze materialnej osiągnięcie takiego stanu nie jest możliwe, ponieważ wiązałoby się to z rozerwaniem ciała materialnego na osobne części. W analizowanym zadaniu części te byłyby kryształami arsenku galu, tellurku cynku i tellurku kadmu. Konfigurację taką nazywa się lokalną izokliniczną konfiguracją odciążoną.

Poniżej przedstawiono zależności pomiędzy współrzędnymi punktu w poszczególnych konfiguracjach, przemieszczeniami i gradientami deformacji. Wprowadzono dwa wektory przemieszczenia:

$\mathbf{u}$  – opisujący różnicę pomiędzy wektorami współrzędnych punktu w konfiguracjach aktualnej i początkowej oraz

$\mathbf{u}_H$  – opisujący różnicę pomiędzy wektorami współrzędnych punktu w konfiguracjach początkowej (obraz mikroskopowy) i pośredniej (beznaprężeniowy stan ciała). Czyli

$$\mathbf{u} = \mathbf{r}_x - \mathbf{R}_{X(x)}, \quad (4.31)$$

$$\mathbf{u}_H = \mathbf{R}_{x_H} - \mathbf{R}_{\hat{x}}. \quad (4.32)$$

Ponieważ w konfiguracji pośredniej na ogół nie można wprowadzić globalnego układu współrzędnych więc pole  $\mathbf{u}_H$  jest odcinkowo ciągle. Różniczkując wektor przemieszczeń (4.32) otrzymano dystorsje sieci odniesione do konfiguracji początkowej  $\boldsymbol{\beta}_H$  oraz dystorsje odniesione do konfiguracji pośredniej  $\hat{\boldsymbol{\beta}}_H$

$$\boldsymbol{\beta}_H = \frac{\partial \mathbf{u}_H}{\partial \mathbf{x}_H}, \quad (4.33)$$

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_H = \frac{\partial \mathbf{u}_H}{\partial \hat{\mathbf{x}}}. \quad (4.34)$$

Wartości dystorsji  $\boldsymbol{\beta}_H$  otrzymano bezpośrednio z programu analizy obrazu (metoda fazy geometrycznej). W algorytmie metody elementów skończonych wykorzystywano dystorsje  $\hat{\boldsymbol{\beta}}_H$ . Niezbędne więc było przekształcenie dystorsji (4.33) pomierzonych w odniesieniu do konfiguracji początkowej na dystorsje (4.34) odniesione do konfiguracji pośredniej. W tym celu wykorzystano różnice w stałych sieci kryształów składowych heterostruktury. Zależności pomiędzy  $\boldsymbol{\beta}_H$  i  $\hat{\boldsymbol{\beta}}_H$  otrzymano poprzez następujące przekształcenia

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_H = \frac{\partial \mathbf{u}_H}{\partial \hat{\mathbf{x}}} = \frac{\partial (\mathbf{x}_H - \hat{\mathbf{x}})}{\partial \hat{\mathbf{x}}} = \frac{\partial \mathbf{x}_H}{\partial \hat{\mathbf{x}}} - \mathbf{1} \quad (4.35)$$

czyli

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_H + \mathbf{1} = \frac{\partial \mathbf{x}_H}{\partial \hat{\mathbf{x}}}. \quad (4.36)$$

Odwracając (4.36) uzyskano

$$\begin{aligned} [\hat{\boldsymbol{\beta}}_H + \mathbf{1}]^{-1} &= \frac{\partial \hat{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{x}_H} \\ &= \frac{\partial (\mathbf{x}_H - \mathbf{u}_H)}{\partial \mathbf{x}_H} = \mathbf{1} - \frac{\partial \mathbf{u}_H}{\partial \mathbf{x}_H} \\ &= \mathbf{1} - \boldsymbol{\beta}_H. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Końcowe zależności mają więc postać

$$\boldsymbol{\beta}_H = \mathbf{1} - [\widehat{\boldsymbol{\beta}}_H + \mathbf{1}]^{-1}, \quad (4.38)$$

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}_H = [\mathbf{1} - \boldsymbol{\beta}_H]^{-1} - \mathbf{1}. \quad (4.39)$$

W podobny sposób można wyprowadzić zależności gradientów deformacji od dystorsji sieci oraz zależność gradientów deformacji od gradientów przemieszczeń

$$\mathbf{F}_H = \frac{\partial \mathbf{x}_H}{\partial \widehat{\mathbf{x}}} = \frac{\partial(\widehat{\mathbf{x}} + \mathbf{u}_H)}{\partial \widehat{\mathbf{x}}} = [\mathbf{1} - \boldsymbol{\beta}_H]^{-1}, \quad (4.40)$$

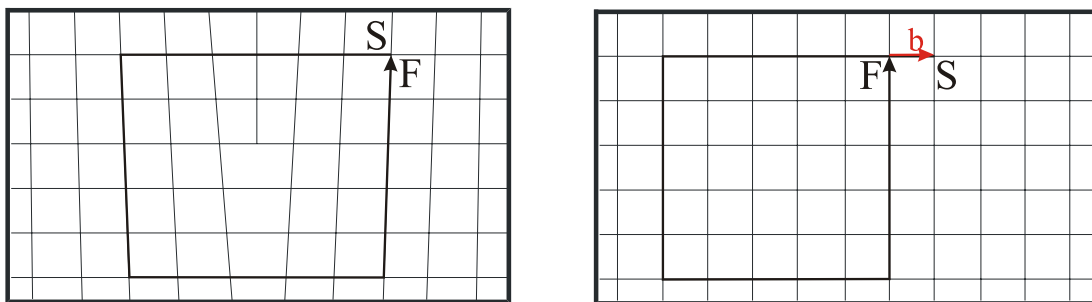
$$\mathbf{F}_o = \mathbf{F}_{ch}^{-1} \frac{\partial \widehat{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{x}_H} = \mathbf{F}_{ch}^{-1} \frac{\partial(\mathbf{x}_H - \mathbf{u}_H)}{\partial \mathbf{x}_H} = \mathbf{F}_{ch}^{-1} [\mathbf{1} - \boldsymbol{\beta}_H], \quad (4.41)$$

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}_H} = \frac{\partial(\mathbf{x}_H + \mathbf{u})}{\partial \mathbf{x}_H} = \mathbf{1} + \text{GRAD } \mathbf{u}, \quad (4.42)$$

$$\mathbf{F}^{-1} = \frac{\partial \mathbf{x}_H}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial(\mathbf{x} - \mathbf{u})}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{1} - \text{grad } \mathbf{u}. \quad (4.43)$$

### 4.1.2 Wektory Burgersa

Kontynuualna teoria dyslokacji przyczyniła się do znacznego postępu w opisie deformacji plastycznych (Kröner, 1981; De Witt, 1981). Teorię tą wykorzystano do wyznaczenia naprężeń wywoływanych przez dyslokacje obecne w strukturach z Rys. 3.1 oraz Rys. 3.2. Poniżej przedstawiono jej ogólny zarys w odniesieniu do analizowanych przykładów.



(a) Sieć zdeformowana.

(b) Sieć niezdeformowana.

Rysunek 4.2: Wyznaczanie wektora Burgersa – metoda FS/RH.

**Opis pojedynczej dyslokacji.** Dla obszaru, w którym znajduje się pojedyncza dyslokacja krawędziowa, zob. Rys. 4.2, miarę zdefektowania sieci kryształu można określić (zob. np. Gairola, 1979; Teodosiu, 1982) przez wprowadzenie dwóch konfiguracji: pierwszej

– zdeformowanej (Rys. 4.2(a)), która odpowiada sieci zawierającej defekty oraz drugiej – niezdeformowanej, która nie zawiera defektów i do której jest odniesiona miara zdeformowania (Rys. 4.2(b)). W konfiguracji pierwszej wykreśla się przeciwie do ruchu wskazówek zegara zamknięty kontur wokół dyslokacji, rozpoczynając od punktu S i kończąc na punkcie F, jednocześnie licząc ilość stałych sieci pokonywanych w każdym z kierunków (Rys. 4.2(a)). Analogiczny kontur wykreślony w drugiej konfiguracji, przy zastosowaniu takiej samej liczby kroków na każdym z kierunków, jak w poprzedniej konfiguracji, nie ulegnie zamknięciu (Rys. 4.2(b)). Łącząc w konfiguracji drugiej punkt F z punktem S otrzymuje się wektor  $\hat{\mathbf{b}}$ , którego długość jest jedną z miar niedopasowania sieci.

Przedstawiony sposób określany jest w skrócie FS/RH (ang. finish start right-hand). Ponieważ konfiguracja, w której wyznaczany jest wektor Burgersa jest dowolna, powyższą procedurę można wykonać zaczynając od konfiguracji drugiej (niezdefektowany kryształ) i zakończyć w konfiguracji pierwszej (zdefektowany kryształ). Uzyskany w ten sposób wektor Burgersa  $\mathbf{b}$  (z połączenia punktu S z punktem F) również jest miarą zdefektowania kryształu. Wektory  $\hat{\mathbf{b}}$  i  $\mathbf{b}$  łączy następująca zależność

$$\mathbf{b} = \mathbf{F}_e \hat{\mathbf{b}}, \quad (4.44)$$

gdzie  $\mathbf{F}_e$  jest tensorem deformacji sprężystej, przeprowadzającym ciało z konfiguracji, w której kryształ nie zawiera defektów, do konfiguracji, w której kryształ jest zdefektowany. Długość wektora Burgersa w konfiguracji aktualnej zależy więc od tensora deformacji sprężystej. Tym samym nie jest on wielkością niezmienniczą. Wielkością miarodajną w ilościowym opisie zdefektowania struktury jest więc długość wektora Burgersa w konfiguracji, w której kryształ jest w stanie beznaprężeniowym. Z tego względu często nazywany on jest prawdziwym wektorem Burgersa. Liniowy charakter dyslokacji jako defektu powoduje, że dyslokacje można opisać lokalnie poprzez dwa wektory: wektor linii dyslokacji  $\mathbf{l}$  oraz wektor Burgersa  $\mathbf{b}$ . Kąt zawarty pomiędzy kierunkami tych wektorów określa rodzaj dyslokacji. Dyslokacja nazywana jest krawędziową gdy  $\mathbf{l} \perp \mathbf{b}$ , śrubową gdy  $\mathbf{l} \parallel \mathbf{b}$ , lub mieszaną w pozostałych przypadkach.

### 4.1.3 Tensory gęstości dyslokacji - miary zdefektowania

Z dyslokacją związana jest niezgodność (niekompatybilność) pola przemieszczeń. Metoda wyznaczania miar zdefektowania kryształu polega na opisie ilościowym tej niekompatybilności. W kontynualnej teorii dyslokacji jako miara dyslokacji wprowadzany jest tensor gęstości dyslokacji. Jego wskaźniki odpowiadają kierunkom linii dyslokacyjnych i kierunkom wektorów Burgersa. Tensor gęstości dyslokacji można wprowadzić



*a priori* lub wyprowadzić z niekompatybilności deformacji sprężystej czy niekompatybilności deformacji plastycznej. Rotacja tensora deformacji przeprowadzającej ciało z konfiguracji aktualnej do konfiguracji odciążonej  $\mathbf{F}_e^{-1}$  jest miarą niekompatybilności pola przemieszczeń sprężystych, ponieważ zawiera człony odpowiadające za niekompatybilność przemieszczeń sąsiednich elementów materialnych. W ośrodku ciągłym wektor Burgersa można zdefiniować jako

$$\hat{\mathbf{b}} \stackrel{df}{=} \oint_C \mathbf{F}_e^{-1} d\mathbf{x} = \int_{S_C} \text{curl } \mathbf{F}_e^{-1} d\mathbf{s} = \int_{S_C} \tilde{\boldsymbol{\alpha}} d\mathbf{s}, \quad (4.45)$$

gdzie jako  $C$ ,  $S_C$ ,  $d\mathbf{s}$  oraz  $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}$  oznaczono kolejno kontur wokół obszaru zawierającego dyslokacje, pole wewnątrz tego konturu, zorientowany element powierzchni oraz tensor gęstości dyslokacji, opisujący gęstość dyslokacji w konfiguracji odciążonej, odniesioną do konfiguracji aktualnej. Ostatnią wielkość można wyrazić zależnością  $\tilde{\boldsymbol{\alpha}} = \text{curl } \mathbf{F}_e^{-1}$ . Deformacja może zmienić pole obszaru zawierającego dyslokacje. Zmianę zorientowanego elementu powierzchni, przy zastosowaniu rozkładu tensora całkowitej deformacji (4.30), opisują następujące relacje <sup>(4)</sup>

$$d\mathbf{s} = \mathbf{F}^{-T} d\bar{\mathbf{s}} \det \mathbf{F}, \quad (4.46)$$

$$d\mathbf{s} = \mathbf{F}_e^{-T} d\hat{\mathbf{s}} \det \mathbf{F}_e, \quad (4.47)$$

$$d\hat{\mathbf{s}} = \mathbf{F}_o^{-T} d\bar{\mathbf{s}} \det \mathbf{F}_o. \quad (4.48)$$

Wektory Burgersa odniesione do poszczególnych konfiguracji zdefiniowano następująco

$$d\mathbf{b} \stackrel{df}{=} \boldsymbol{\alpha} d\mathbf{s}, \quad (4.49)$$

$$d\bar{\mathbf{b}} \stackrel{df}{=} \bar{\boldsymbol{\alpha}} d\bar{\mathbf{s}}, \quad (4.50)$$

$$d\hat{\mathbf{b}} \stackrel{df}{=} \hat{\boldsymbol{\alpha}} d\hat{\mathbf{s}}. \quad (4.51)$$

W powyższych wzorach, zgodnie z zasadą przyjętą na początku tego rozdziału, przez  $\boldsymbol{\alpha}$ ,  $\bar{\boldsymbol{\alpha}}$ ,  $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$  oznaczono odpowiednio tensor gęstości dyslokacji w konfiguracji aktualnej, początkowej oraz odciążonej. Ten ostatni, przez analogię do prawdziwego wektora Burgersa, nazywany jest prawdziwym tensorem gęstości dyslokacji. Podstawiając (4.47) do (4.45) otrzymuje się

$$\hat{\mathbf{b}} \stackrel{df}{=} \int_{\hat{S}_C} \det \mathbf{F}_e \text{curl } \mathbf{F}_e^{-1} \mathbf{F}_e^{-T} d\hat{\mathbf{s}}. \quad (4.52)$$

<sup>4</sup>Zorientowany element powierzchniowy zdefiniowany jest jako iloczyn jednostkowego wektora normalnego do powierzchni i pola powierzchni elementu, tzn.  $d\mathbf{s} \stackrel{df}{=} \mathbf{n} ds$ .

Ponieważ we wzorze (4.52) zarówno wektor Burgersa, jak i element powierzchniowy wyrażone są w konfiguracji odciążonej, wygodnie jest zdefiniować prawdziwy tensor gęstości dyslokacji jako

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} \stackrel{df}{=} \det \mathbf{F}_e \operatorname{curl} \mathbf{F}_e^{-1} \mathbf{F}_e^{-T}. \quad (4.53)$$

Z równań zgodności wynika, że wyrażenie na prawdziwy tensor gęstości dyslokacji  $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$  można też określić na podstawie tensora deformacji wstępnej  $\mathbf{F}_\circ$ , która w kontynualnej teorii dyslokacji nazywana jest deformacją plastyczną. Przekształcając (4.45) otrzymano

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{b}} &= \oint_C \mathbf{F}_e^{-1} d\mathbf{x} \\ &= \oint_C \mathbf{F}_\circ \mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x} = \oint_{\bar{C}} \mathbf{F}_\circ \mathbf{F}^{-1} \mathbf{F} d\mathbf{X} \\ &= \oint_{\bar{C}} \mathbf{F}_\circ d\mathbf{X} = \int_{\bar{C}} \operatorname{CURL} \mathbf{F}_\circ d\bar{\mathbf{s}} \\ &= \int_{\hat{C}} \det \mathbf{F}_\circ^{-1} \operatorname{CURL} \mathbf{F}_\circ \mathbf{F}_\circ^T d\hat{\mathbf{s}}. \end{aligned} \quad (4.54)$$

$\hat{\boldsymbol{\alpha}}$  można więc zdefiniować następująco

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \det \mathbf{F}_\circ^{-1} \operatorname{CURL} \mathbf{F}_\circ \mathbf{F}_\circ^T. \quad (4.55)$$

Łatwo dostrzec, że utożsamiając w powyższej zależności

$$\mathbf{F}_e^{-1} \equiv \mathbf{F}_\circ \quad (4.56)$$

i zmieniając konfigurację, w której wykonano operację wirowości z aktualnej na odciążoną, otrzymuje się taką samą miarę zdefektowania, jak we wzorze (4.53). Podobieństwo wzorów (4.53) i (4.55) wynika z warunku nierozdzielności. Wirowość tensora deformacji całkowitej jest równa zero, ponieważ odkształcenia całkowite są zgodne, natomiast wirowość tensora deformacji wstępnej (czy też plastycznej) może być różna od zera. Dla jej skompensowania niezbędna jest więc (Kröner, 1981) taka deformacja sprężysta, której wirowość tensora gradientu deformacji ma taką samą wartość bezwzględną, jak wirowość tensora gradientu deformacji wstępnej, ale jest przeciwnego znaku. Długość wektora Burgersa (element liniowy) zmienia się w sposób następujący  $d\mathbf{b} = \mathbf{F}_e d\hat{\mathbf{b}}$ ,  $d\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{F}_\circ d\bar{\mathbf{b}}$ , więc zależności pomiędzy tensorami gęstości dyslokacji w poszczególnych konfiguracjach są następujące

$\bar{\boldsymbol{\alpha}} \leftrightarrow \hat{\boldsymbol{\alpha}}$	$\hat{\boldsymbol{\alpha}} \leftrightarrow \boldsymbol{\alpha}$	$\bar{\boldsymbol{\alpha}} \leftrightarrow \boldsymbol{\alpha}$
$\bar{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{F}_\circ^{-1} \hat{\boldsymbol{\alpha}} \mathbf{F}_\circ^{-T} \det \mathbf{F}_\circ$	$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{F}_e^{-1} \boldsymbol{\alpha} \mathbf{F}_e^{-T} \det \mathbf{F}_e$	$\bar{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\alpha} \mathbf{F}^{-T} \det \mathbf{F}$
$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \mathbf{F}_\circ \bar{\boldsymbol{\alpha}} \mathbf{F}_\circ^T \det^{-1} \mathbf{F}_\circ$	$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{F}_e \hat{\boldsymbol{\alpha}} \mathbf{F}_e^T \det^{-1} \mathbf{F}_e$	$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{F} \bar{\boldsymbol{\alpha}} \mathbf{F}^T \det^{-1} \mathbf{F}$

Na podstawie (4.53) oraz wzorów z powyższej tabeli można przedstawić *explicite* definicję tensora gęstości dyslokacji w konfiguracji aktualnej jako

$$\boldsymbol{\alpha} \stackrel{df}{=} \mathbf{F}_e \operatorname{curl} \mathbf{F}_e^{-1}. \quad (4.57)$$

Więcej zależności dla tensora gęstości dyslokacji znaleźć można m. in. w pracy Dłużewski (1996) - wzory 3.110 – 3.113, 3.120 – 3.125, 3.132 – 3.133.

## 4.2 Termodynamika ośrodka z dyslokacjami

W kontynualnej teorii dyslokacji nie ma standardowego postępowania dla ciał zawierających dyslokacje. Istniejące sformułowania różnią się zarówno liczbą zmiennych stanu, jak i liczbą praw bilansu. Ośrodek z dyslokacjami bywa opisywany w ramach geometrii euklidesowej lub nieeuklidesowej, za pomocą symetrycznej lub niesymetrycznej teorii sprężystości (m. in. Kröner, 1981; De Witt, 1981; Le i Stumpf, 1996; Cermelli i Sellers, 1998).

Poniżej opisano sformułowanie w zakresie symetrycznej teorii sprężystości, ale bez rozszerzania listy standardowych praw bilansów ośrodka sprężystego, zob. pełny opis takiego sformułowania w pracy Dłużewski (1996). Dla uwzględnienia dyslokacji, w opisie wprowadzono dodatkowe człony w równaniach bilansów. Prawa bilansu masy, pędu, momentu pędu, energii i nierówności entropii mają postać:

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho dv = 0, \quad (4.58)$$

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho \mathbf{v} dv = \int_s \boldsymbol{\sigma} ds + \int_v \rho \mathbf{f}_b dv, \quad (4.59)$$

$$\frac{d}{dt} \int_v \mathbf{x} \times \rho \mathbf{v} dv = \int_s \mathbf{x} \times \boldsymbol{\sigma} ds + \int_v \mathbf{x} \times \rho \mathbf{f}_b dv, \quad (4.60)$$

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho u + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \mathbf{v} dv = \int_s \mathbf{v} \boldsymbol{\sigma} ds + \int_v \rho \mathbf{f}_b \mathbf{v} dv - \int_s \mathbf{q}_T ds - \int_s \mathbf{q} ds + \int_v \rho h dv, \quad (4.61)$$

$$\frac{d}{dt} \int_v \rho \eta dv \geq - \int_s \frac{\mathbf{q}_T}{T} ds + \int_v \frac{\rho h}{T} dv, \quad (4.62)$$

gdzie  $\rho$ ,  $\boldsymbol{\sigma}$ ,  $\mathbf{f}_b$ ,  $\mathbf{x}$ ,  $u$ ,  $\mathbf{q}_T$ ,  $h$ ,  $\eta$ ,  $T$  oznaczają odpowiednio gęstość masy, tensor naprężeń Cauchy'ego, gęstość sił masowych, wektor położenia punktu, gęstość energii wewnętrznej, wektor strumienia ciepła, gęstość produkcji ciepła, gęstość entropii oraz temperaturę. Dodatkowo, w stosunku do standardowej postaci praw bilansu, wprowadzono nowy człon  $\mathbf{q}$ , który opisuje strumień energii związany z zależnością energii swobodnej od miary gęstości dyslokacji. Powyższe równania całkowe prowadzą do następujących równań różniczkowych

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (4.63)$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f}_b - \rho \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{0}, \quad (4.64)$$

$$\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^T = \mathbf{0}, \quad (4.65)$$

$$-\rho \dot{u} + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}_e + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}_p - \operatorname{div} \mathbf{q} - \operatorname{div} \mathbf{q}_T + \rho h = 0, \quad (4.66)$$

$$-\rho \dot{\psi} - \rho \eta \dot{T} + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}_e + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d}_p - \operatorname{div} \mathbf{q} - \frac{\mathbf{q}_T}{T} \operatorname{grad} T \geq 0, \quad (4.67)$$

gdzie  $\mathbf{d}_e$  jest symetrycznym tensorem prędkości deformacji sprężystej, natomiast  $\mathbf{d}_p = \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}_d$  jest niesymetrycznym (ogólnie) tensorem prędkości deformacji plastycznej, natomiast  $\mathbf{v}_d$  jest wektorem prędkości ruchu dyslokacji względem cząstek materialnych. Energia swobodna właściwa określona jest wzorem  $\psi = u - \eta T$ . Po założeniu postaci energii swobodnej można z powyższych równań otrzymać siły termodynamiczne rządzące ruchem dyslokacji w ośrodku sprężystym. W niniejszej pracy rozważano tylko dyslokacje w stanie spoczynku, niezbędne jest więc tylko równanie równowagi

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \quad (4.68)$$

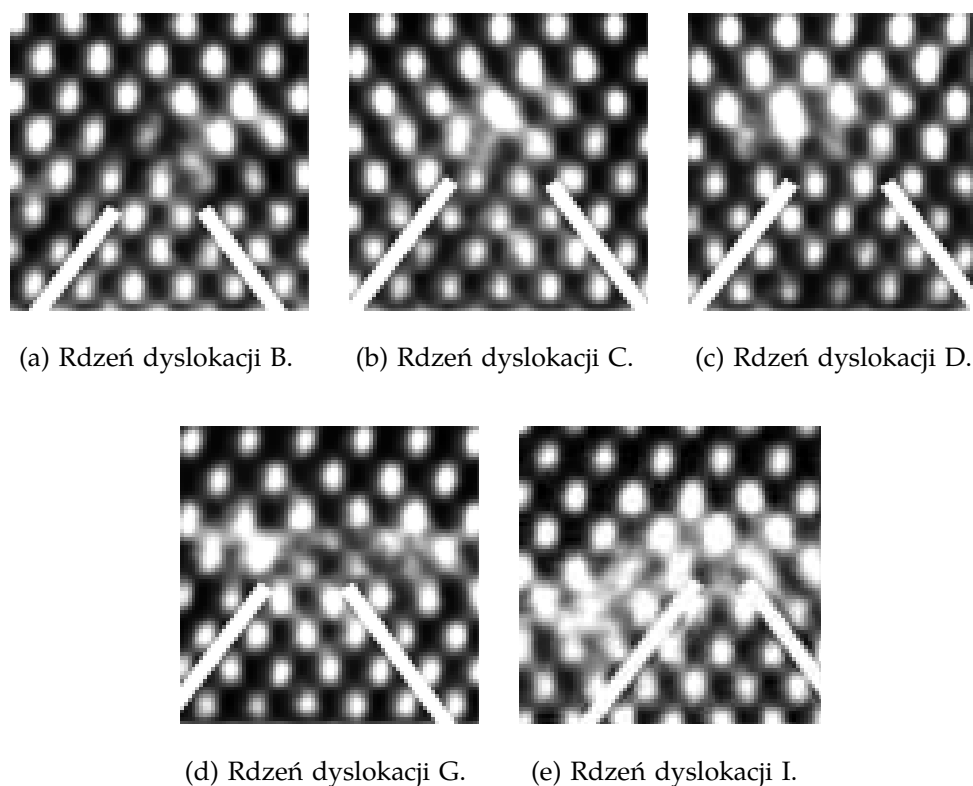
oraz równanie konstytutywne

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\alpha}). \quad (4.69)$$

To ostatnie wyspecyfikowano w dalszej części pracy, po określeniu postaci energii swobodnej. Zastosowano również związki kinematyczne przedstawione wcześniej.

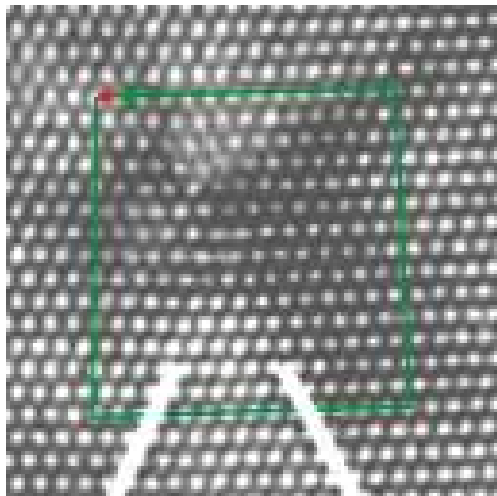
### 4.2.1 Równania konstytutywne

Wpływ dyslokacji na charakterystykę mechaniczną materiału opisywany jest zwykle dobrze sprawdzonymi metodami kontynualnymi. We wszystkich z nich pomijany jest jednak obszar rdzenia dyslokacji, którego analiza w ramach mechaniki ośrodków ciągłych jest bardzo trudna. Układ atomów w rdzeniu dyslokacji wpływa na przebieg wielu procesów. Wpływ ten jest szczególnie widoczny w zjawiskach dysocjacji dyslokacji na dyslokacje częściowe, w ruchu dyslokacji, w interakcji dyslokacji z innymi defektami kryształu. Dokładny opis takich zjawisk poprzez mechanikę kontinuum wydaje się niemożliwy. Nawet tam, gdzie metody kontynualne mogą być stosowane, tj. gdy rozkład

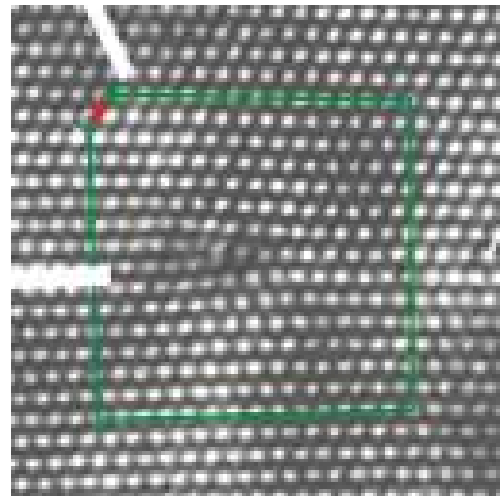


Rysunek 4.3: Rdzenie dyslokacji B, C, D, G, I w strukturze CdTe/ZnTe/GaAs (oznaczenia wg. Rys. 3.1).

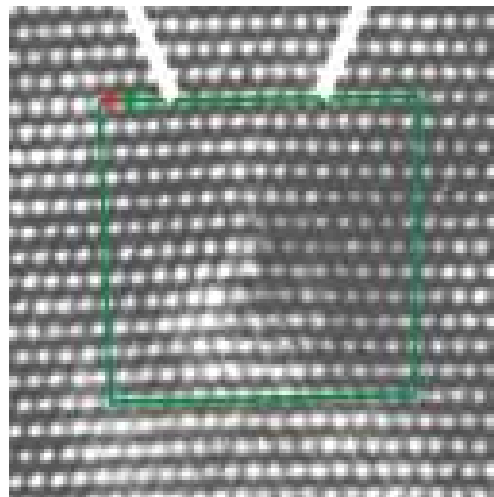
atomów w rdzeniach dyslokacji nie wpływa znacząco na przebieg procesu, metody dyskretne są pomocne w zweryfikowaniu danych dotyczących tak podstawowych wielkości, jak np. szerokość rdzenia dyslokacji. Za rdzeń dyslokacji przyjmuje się obszar, w którym następuje odchylenie od liniowego zachowania się materiału, tj. gdy naprężenie  $\sigma$  nie może być opisane jako zmienna liniowo proporcjonalna do odwrotności odległości od rdzenia dyslokacji (Boyko i in., 1994). Rozkłady atomów w rdzeniach wybranych dyslokacji ze struktur CdTe/ZnTe/GaAs i GaN przedstawiono na Rys. 4.3 oraz Rys. 4.4.



(a) Rdzeń dyslokacji B.



(b) Rdzeń dyslokacji P.



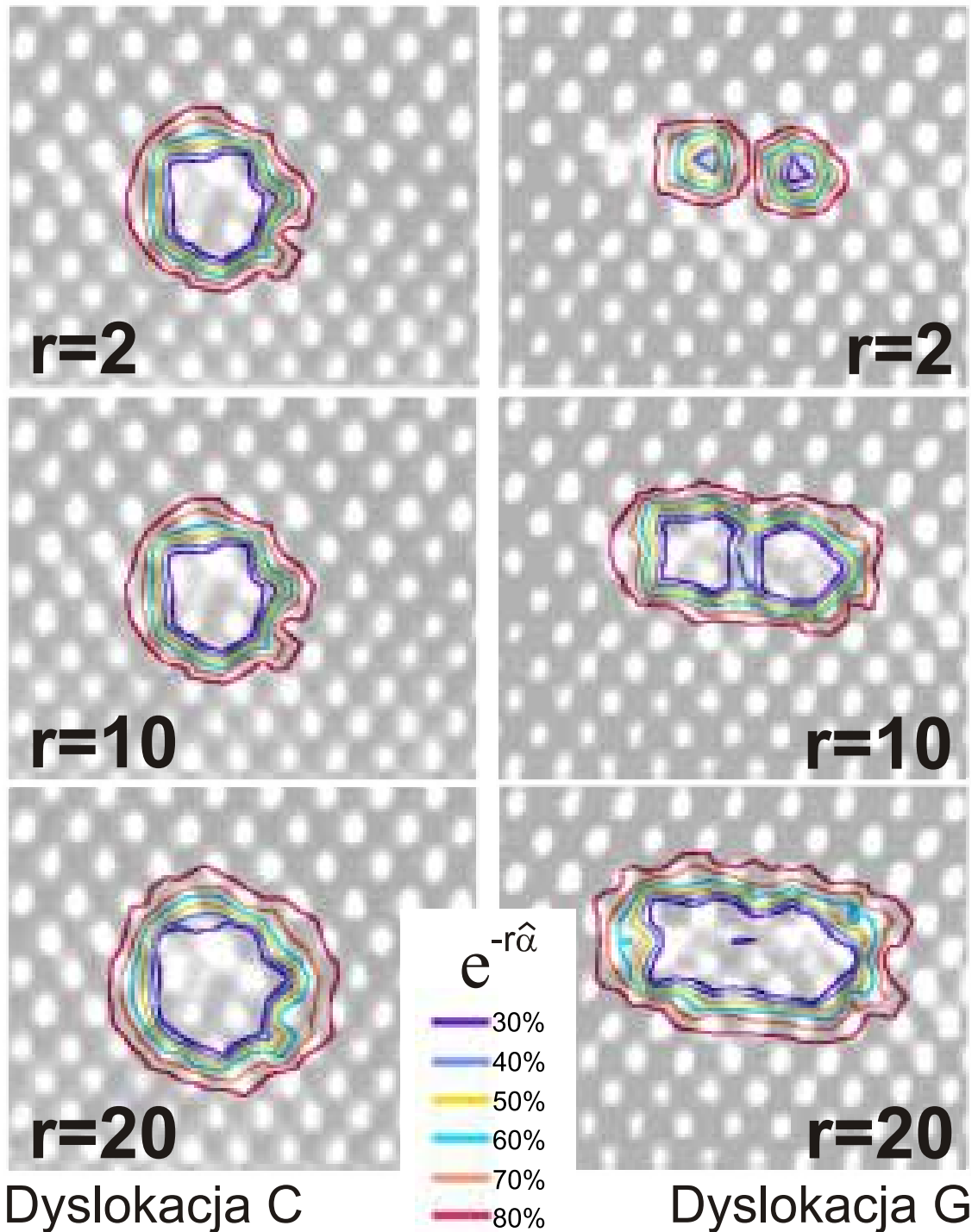
(c) Rdzeń dyslokacji R.

Rysunek 4.4: Rdzenie dyslokacji B, P, R w strukturze GaN (oznaczenia wg. Rys. 3.2).

Dyslokacja	Idealna sieć CdTe		Konfiguracja odciążona		Konfiguracja aktualna		Idealna sieć GaAs	
	$\hat{b}_x$	$\hat{b}_y$	$\hat{b}_x$	$\hat{b}_y$	$b_x$	$b_y$	$b_x$	$b_y$
A	-0.3997	0.0	-0.401	-0.002	-0.454	0.011	-0.4583	0.0
B	-0.3997	0.0	-0.401	-0.002	-0.451	0.023	-0.4583	0.0
C	-0.3997	0.0	-0.400	-0.002	-0.443	0.009	-0.4583	0.0
D	-0.3997	0.0	-0.401	-0.002	-0.421	-0.005	-0.4583	0.0
E	-0.3997	0.0	-0.401	-0.002	-0.442	-0.004	-0.4583	0.0
F	-0.3997	0.0	-0.401	-0.002	-0.444	0.028	-0.4583	0.0
G	-0.3997	0.0	-0.401	-0.002	-0.442	0.000	-0.4583	0.0
H	-0.3997	0.0	-0.401	-0.002	-0.421	0.007	-0.4583	0.0
I	-0.3997	0.0	-0.401	-0.002	-0.451	-0.002	-0.4583	0.0
J	-0.1999	0.2818	-0.201	0.283	-0.233	0.313	-0.2291	0.3241
K	-0.1999	-0.2818	-0.200	-0.285	-0.254	-0.333	-0.2291	-0.3241

Tablica 4.1: Wektory Burgersa  $[nm]$  dyslokacji w strukturze CdTe/ZnTe/GaAs w odniesieniu do różnych konfiguracji czyli różnych sieci krystalicznych. Dane z pracy Kret i in. (2000) (oznaczenia dyslokacji wg. Rys. 3.1).

Wynika z nich, że rozkłady atomów w rdzeniach poszczególnych dyslokacji znacznie się między sobą różnią. Rdzenie dyslokacji w strukturze CdTe/ZnTe/GaAs (Rys. 4.3) są dodatkowo zaburzone przez nierównomierny rozkład atomów warstwy cynku. Wysoka temperatura, w której prowadzony jest wzrost warstwy sprzyja dyfuzji składników. Atomy w obszarach rdzeni dyslokacji, ze względu na zaburzenie sieci, przemieszczają się łatwiej, niż atomy w uporządkowanej sieci krystalicznej. Długości wektorów Burgersa otrzymane na podstawie pomiaru dystorsji sieci odpowiadają wartościom stabilizowanym dla tej struktury krystalicznej, stąd założono, że konfiguracje dyslokacji przedstawione na Rys. 3.1 oraz Rys. 3.2 są konfiguracjami stabilnymi termodynamicznie. Wartości składowych wektora Burgersa z pracy Kret i in. (2000) przedstawiono w Tab. 4.1. Założono zatem, że opis metodami mechaniki kontinuum jest adekwatny, ale powinien on uwzględniać specyfikę mechanicznych właściwości materiału w obszarach rdzeni dyslokacji. Rdzeń dyslokacji wprowadza zaburzenie sieci krystalicznej, a więc



Rysunek 4.5: Osłabienie stałych sztywności w celu uwzględnienia zmniejszonej możliwości przenoszenia naprężeń w obszarach rdzeni dyslokacji (struktura CdTe/ZnTe/GaAs). Pokazano zasięg takiego osłabienia dla dwóch dyslokacji oraz dla trzech wartości parametru  $r$ .



sztynność materiału w tym obszarze jest obniżona. Ze względu na bardzo zaburzoną strukturę krystaliczną w obszarach rdzeni dyslokacji, materiał w tych obszarach ma znikome możliwości przenoszenia naprężeń (zob. rozkład atomów w rdzeniu B i G, przedstawionych na Rys. 4.3(a) i Rys. 4.3(d)). Ponieważ trudno wprowadzić inny, mniej sztywny materiał wewnątrz rdzeni dyslokacji, wykorzystano miarę zdefektowania sieci, czyli tensor gęstości dyslokacji (4.55). Parametr obrazujący wpływ zdefektowania sieci na osłabienie stałych sztywności przyjęto w postaci skalara

$$\hat{\alpha} = \sqrt{\hat{\alpha}_{xz}^2 + \hat{\alpha}_{yz}^2}, \quad (4.70)$$

gdzie  $\hat{\alpha}_{xz}$  oraz  $\hat{\alpha}_{yz}$  są odpowiednimi składowymi tensora gęstości dyslokacji  $\hat{\alpha}$  w konfiguracji odciążonej. Skalar  $\hat{\alpha}$  jest miarą odchylenia sieci krystalicznej od stanu naturalnego. Przyjęto, że tensor stałych sztywności drugiego rzędu ośrodka zawierającego dyslokacje wyrażony jest wzorem

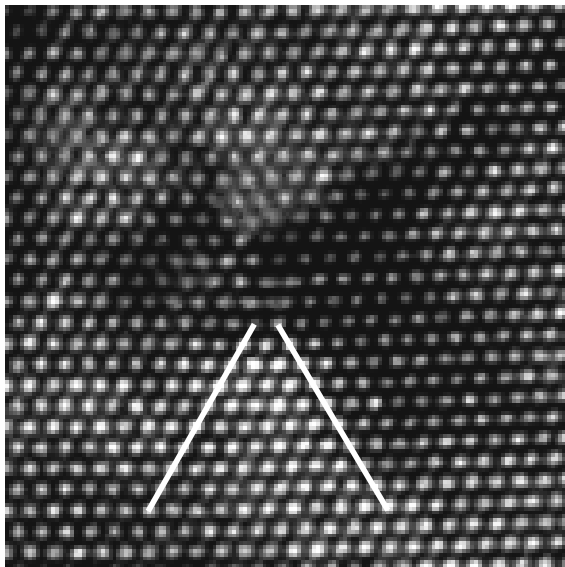
$$\hat{c}_\alpha = e^{-r\hat{\alpha}} \hat{c}, \quad (4.71)$$

gdzie  $r$  jest parametrem proporcjonalności, który nazwano parametrem szerokości rdzenia dyslokacji. Tensor stałych sztywności trzeciego rzędu przyjęto w postaci

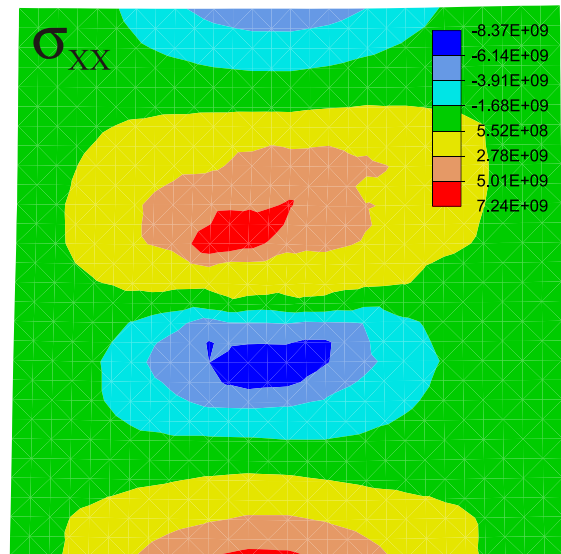
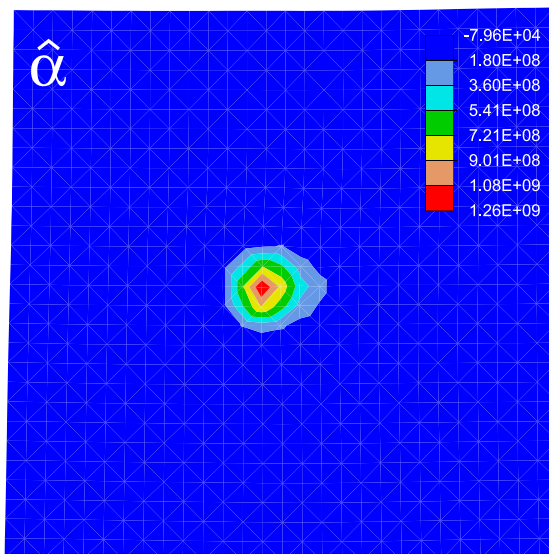
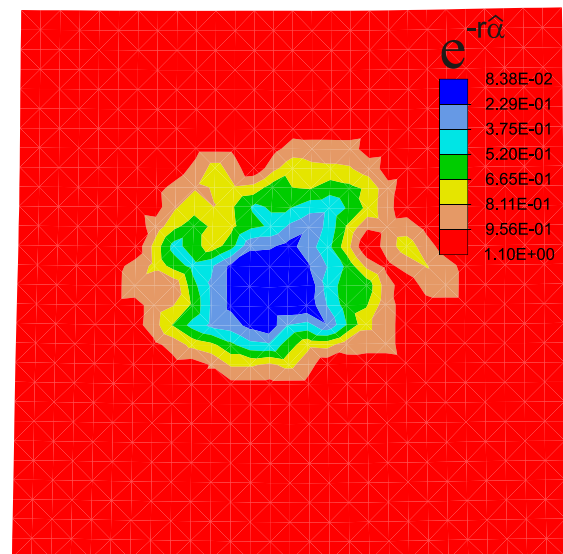
$$\hat{C}_\alpha = e^{-2r\hat{\alpha}} \hat{C}. \quad (4.72)$$

We wzorach (4.71) i (4.72), przez  $\hat{c}$  i  $\hat{C}$  oznaczono tensory stałych sztywności drugiego i trzeciego rzędu odpowiadające kryształowi w stanie naturalnym.

Parametr  $r$  jest charakterystyczny dla kryształów łączonych. Spełnia on taką rolę, jak parametry charakteryzujące siłę wiązań atomowych w symulacjach metodą dynamiki molekularnej. W prosty sposób pozwala uwzględnić wpływ zdefektowania sieci kryształu na makroskopowe własności mechaniczne materiału. Tak zdefiniowany parametr szerokości rdzenia  $r$  jest analogiczny do parametru szerokości rdzenia  $s$ , wprowadzonego przez Foremana i in., zob. Rys. 2.6. Parametr  $r$  można wyznaczać graficznie przez analizę kształtu rdzeni dyslokacji. Na Rys. 4.5 przedstawiono rdzenie dwóch dyslokacji C i G (wg. oznaczeń z Rys. 3.1). Wokół nich naniesiono poziomicę wykresu funkcji  $e^{-r\hat{\alpha}}$ . Parametr szerokości rdzenia dyslokacji  $r$  powinien być dobrany tak, by osłabienie sztywności materiału odpowiadało kształtowi rdzeni dyslokacji. Metodę taką łatwo zautomatyzować. Na podstawie analizy rdzeni dyslokacji w strukturze azotku galu okazało się jednak, że taki intuicyjny sposób wyznaczania parametru  $r$  nie jest uniwersalny. Otrzymane piki tensorowego pola gęstości dyslokacji są znacznie bardziej zlokalizowane w strukturze GaN niż w heterostrukturze CdTe/ZnTe/GaAs. Odniesienie to uwzględnia stosunek wymiaru obszaru zajmowanego przez rdzeń dyslokacji do rozmiaru sieci danego kryształu. Rdzenie dyslokacji w strukturze GaN zajmują bardzo



(a) Obraz mikroskopowy.

(b) Rozkład naprężeń  $\sigma_{xx}$ .(c) Parametr  $\hat{\alpha}$ , zob. wzór (4.70).(d) Parametr  $e^{-r\hat{\alpha}}$ , zob. wzór (4.71).

Rysunek 4.6: Obraz rdzenia dyslokacji C z Rys. 3.2, wraz z wykresami naprężeń  $\sigma_{xx}$  oraz parametrów  $\hat{\alpha}$  i  $e^{-r\hat{\alpha}}$ .

mały obszar, nie można więc zastosować do nich takiej samej metody, jak w przypadku struktury CdTe/ZnTe/GaAs. Wprowadzone osłabienie wynikałoby wtedy bardziej z postaci funkcji kształtu elementu skończonego, niż z kształtu rdzenia dyslokacji. Z tego powodu, parametr  $r$  dla struktury GaN wyznaczony został poprzez nałożenie poziomów osłabienia stałych sztywności na wykres naprężeń wokół rdzeni dyslokacji. Obniżenie wartości stałych sztywności występuje w miejscach występowania znacznych nieliniowości naprężeń (zob. Rys. 4.4).

Wyznaczanie parametru  $r$  leży u podstaw teorii dyslokacji. Proponowany sposób jego wyznaczania zawiera pewne uproszczenia i dowolność doboru oraz jest trudny do zautomatyzowania. Ocena jego przydatności i adekwatności możliwa jest przy wykorzystaniu symulacji atomowych.

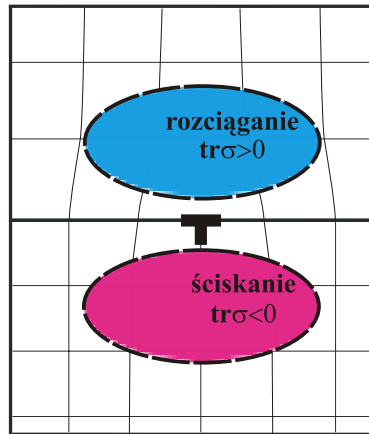
**Postać energii swobodnej.** W przypadku warunków izotermicznych, energia swobodna materiału zawierającego dyslokacje uzależniona jest zarówno od miary odkształcenia sprężystego, jak również od miary zdefektowania kryształu. Przyjęto, że energia swobodna zależna jest od następujących zmiennych

$$\psi = \psi(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}), \quad (4.73)$$

gdzie  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$  jest tensorem odkształcenia sprężystego, który wyspecyfikowany zostanie później, a  $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$  tensorem gęstości dyslokacji (4.55). W literaturowych sformułowaniach dla podobnych zagadnień energia swobodna, poza zależnością od tensora odkształceń sprężystych, zależy również od gradientu tensora deformacji sprężystej, zob. np. Le i Stumpf (1996). Poniżej pokazano przejście od zależności (4.73), w której energia zależy od tensora gęstości dyslokacji do takiej, w której jest zależna od gradientu deformacji sprężystej. Wychodząc z równań nierozdzielności:  $\text{CURL } \mathbf{F} = \mathbf{0}$  lub  $\text{curl } \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{0}$  i podstawiając (4.30), otrzymano

$$\text{GRAD } \mathbf{F}_e \times \mathbf{F}_o = -\mathbf{F}_e \text{ CURL } \mathbf{F}_o, \quad (4.74)$$

$$\text{grad } \mathbf{F}_o^{-1} \times \mathbf{F}_e^{-1} = -\mathbf{F}_o^{-1} \text{ curl } \mathbf{F}_e^{-1}, \quad (4.75)$$



Rysunek 4.7: Schemat rozkładu naprężeń wokół dyslokacji niedopasowania.

a stąd <sup>(5)</sup>, poszukiwane zależności, pozwalające ze wzoru (4.53) uzyskać zależność energii swobodnej od gradientu tensora deformacji sprężystej, mają postać

$$\text{CURL } \mathbf{F}_o = -\mathbf{F}_e^{-1} \text{GRAD } \mathbf{F}_e \dot{\times} \mathbf{F}_o, \quad (4.80)$$

$$\text{curl } \mathbf{F}_e^{-1} = -\mathbf{F}_o \text{grad } \mathbf{F}_o^{-1} \dot{\times} \mathbf{F}_e^{-1}. \quad (4.81)$$

Można więc napisać bezpośrednio

$$\psi = \psi(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}, \text{grad } \mathbf{F}_e). \quad (4.82)$$

W powyższym wzorze założono, że  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{F}_e)$ . Dokładną postać tej funkcji pokazano poniżej.

**Sprężystość kryształów zawierających defekty.** Stosując rozkład polarny tensora deformacji sprężystej  $\mathbf{F}_e = \mathbf{R}_e \mathbf{U}_e$ , zdefiniować można rodzinę tensorowych funkcji od-

<sup>5</sup>w notacji indeksowej pierwsze z powyższych równań otrzymuje się poprzez przekształcenia

$$F^k_{K,M} e^{KM}_N = 0, \quad (4.76)$$

stąd

$$F^k_{L,M} F^L_{K,M} e^{KM}_N + F^k_{L,M} F^L_{K,M} e^{KM}_N = 0. \quad (4.77)$$

Postać końcowa jest następująca

$$F^k_{L,M} F^L_{K,M} e^{KM}_N = -F^k_{L,M} F^L_{K,M} e^{KM}_N. \quad (4.78)$$

Analogicznie dla  $\text{curl } \mathbf{F}_e^{-1}$  otrzymuje się

$$\bar{F}^{-1K}_{L,m} \bar{F}^{-1L}_{e,k} e^{mk}_n = -\bar{F}^{-1K}_{L,m} \bar{F}^{-1L}_{e,k} e^{mk}_n. \quad (4.79)$$

kształceń postaci

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \stackrel{\text{df}}{=} f(u_i) \mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i, \quad (4.83)$$

gdzie  $u_i, \mathbf{u}_i$  oznaczają  $i$ -tą wartość własną oraz  $i$ -ty wektor własny prawego tensora odkształceń. Natomiast  $f(\cdot)$  jest dowolnie wybraną funkcją klasy  $C^1$ , monotonicznie rosnącą i spełniającą warunki  $f(x)|_{x=1} = 0$  oraz  $\frac{df(x)}{dx}|_{x=1} = 1$ . Stąd, można określić (Seth, 1964) rodzinę miar odkształceń

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \stackrel{\text{df}}{=} \begin{cases} \frac{1}{m}(\mathbf{U}_e^m - \mathbf{1}) & \text{dla } m \neq 0 \\ \ln \mathbf{U}_e & \text{dla } m = 0 \end{cases}, \quad (4.84)$$

dla  $m \in \mathcal{N}$ . Najczęściej stosowaną miarą jest tensor odkształceń Greena-Lagrange'a, odpowiadający według definicji (4.84)  $m = 2$ . Dla tej miary i skoniugowanego z nią przez pracę drugiego tensora naprężeń Piola-Kirchhoffa wyznaczane są stałe sztywności, zob. Brugger (1964). O ile dla stałych sztywności drugiego rzędu, przy przyjęciu innej miary odkształceń, nie następuje zmiana ich wartości, to już stałe trzeciego rzędu są zależne od przyjętej miary odkształceń.

Wstawiając (4.82) i (4.84) (dla  $m=0$ ) do prawa bilansu energii i nierówności entropii, można wyznaczyć zależność określającą tensor naprężeń Cauchy'ego, zob. Dłużewski (2000),

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{R}_e(\hat{\mathcal{A}} : \hat{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}}) \mathbf{R}_e^T \det \mathbf{F}_e^{-1}, \quad (4.85)$$

gdzie

$$\hat{\mathcal{A}}_{IJJ} = \hat{\mathcal{A}}_{JJI} = \begin{cases} \delta_{IJ} u_I f'(u_I) & \text{dla } u_I = u_J \\ \frac{u_I u_J [f(u_I) - f(u_J)]}{u_I^2 - u_J^2} & \text{dla } u_I \neq u_J, \end{cases} \quad (4.86)$$

przy czym  $\hat{\rho}$  oznacza gęstość masy w konfiguracji odniesienia. W przypadku logarytmicznej miary odkształceń  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \ln \mathbf{U}_e$ , wzór (4.86) przyjmuje postać

$$\hat{\mathcal{A}}_{IJJ} = \begin{cases} \delta_{IJ} & \text{dla } \hat{\varepsilon}_I = \hat{\varepsilon}_J \\ \frac{2(\hat{\varepsilon}_I - \hat{\varepsilon}_J)}{e^{\hat{\varepsilon}_I - \hat{\varepsilon}_J} - e^{\hat{\varepsilon}_J - \hat{\varepsilon}_I}} & \text{dla } \hat{\varepsilon}_I \neq \hat{\varepsilon}_J, \end{cases} \quad (4.87)$$

gdzie  $\hat{\mathcal{A}}_{IJJ}$  jest reprezentacją tensora czwartego rzędu w bazie wektorów własnych  $\{\mathbf{u}_i\}$ . Za Dłużewskim (Dłużewski, 2000) przyjęto dwie miary odkształceń  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$  oraz  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'$  spełniające zależność (4.84). Przekształcając (4.84) otrzymano następującą relację pomiędzy nimi

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}') = \frac{1}{m} \left[ (m' \hat{\varepsilon}'_i + 1)^{\frac{m}{m'}} - 1 \right] \mathbf{u}_i \otimes \mathbf{u}_i, \quad (4.88)$$

gdzie  $\hat{\varepsilon}'_i$  jest  $i$ -tą wartością własną  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'$ , natomiast  $\mathbf{u}_i$  jest wektorem własnym obu tensorów odkształceń  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}', \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$  i  $\mathbf{U}_e$ . Rozwijając funkcję energii swobodnej w szereg Taylora, uzyskano

$$\psi(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}')) = \frac{1}{\hat{\rho}} \left[ \frac{1}{2!} \hat{C}^{ijkl} \hat{\varepsilon}'_{ij} \hat{\varepsilon}'_{kl} + \frac{1}{3!} \hat{C}^{ijklmnp} \hat{\varepsilon}'_{ij} \hat{\varepsilon}'_{kl} \hat{\varepsilon}'_{mn} + \dots \right], \quad (4.89)$$

Materiał	m	$C_{111}$	$C_{112}$	$C_{123}$	$C_{144}$	$C_{166}$	$C_{456}$	źródło
GaAs	2	-675	-402	-4	-70	-320	-69	Drabble i Brammer (1966)
	0	-39	-294	-4	-16	-115	20	
CdTe	2	-213	-210	-42	14	-65	5	Walker i in. (1985)
	0	111	-136	-42	51	13	29	
ZnTe	2	-76	-395	-71	176	-296	151	Garg i in. (1978)
	0	351	-314	-71	217	-178	198	
Ge	2	-720	-380	-30	-10	-305	-45	Drabble i Fendley (1967)
	0	24	-298	-30	31	-87	57	
Si	2	-744	-418	2	29	-315	-70	Drabble i Gluyas (1965)
	0	252	-290	2	93	-41	40	

Tablica 4.2: Stałe sztywności trzeciego rzędu [GPa] dla modelu Saint-Venanta – wykładnik  $m = 2$  oraz dla modelu logarytmicznego – wykładnik  $m = 0$ , zależność (4.94).

gdzie

$$\hat{c}' = \frac{1}{2! \hat{\rho}} \frac{\partial^2 \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'))}{\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}' \partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}'} \Big|_{\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'=0}, \quad \hat{C}' = \frac{1}{3! \hat{\rho}} \frac{\partial^3 \psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{\epsilon}'))}{\partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}' \partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}' \partial \hat{\boldsymbol{\epsilon}}'} \Big|_{\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'=0}, \quad \dots \quad (4.90)$$

Stąd, porównując  $\psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}'))$  i  $\psi(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}')$ , otrzymano (Dłużewski, 2000)

$$\hat{c}'^{ijkl} = \hat{c}^{ijkl}, \quad (4.91)$$

$$\hat{C}'^{ijklmn} = \hat{C}^{ijklmn} + (m - m') \left[ \mathcal{J}^{ijkl}{}_{ab} \hat{c}^{abmn} + \mathcal{J}^{klmn}{}_{ab} \hat{c}^{abij} + \mathcal{J}^{mnij}{}_{ab} \hat{c}^{abkl} \right], \quad (4.92)$$

gdzie reprezentacja  $\mathcal{J}$  wyrażona w dowolnym ortogonalnym układzie współrzędnych przybiera postać

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{ijklmn} = & \frac{1}{8} (\delta_{ik} \delta_{jm} \delta_{ln} + \delta_{ik} \delta_{jn} \delta_{lm} + \delta_{il} \delta_{jm} \delta_{kn} + \delta_{il} \delta_{jn} \delta_{km} \\ & + \delta_{im} \delta_{jk} \delta_{ln} + \delta_{im} \delta_{jl} \delta_{kn} + \delta_{in} \delta_{jk} \delta_{lm} + \delta_{in} \delta_{jl} \delta_{km}). \end{aligned} \quad (4.93)$$

Dla symetrycznej teorii sprężystości, wygodnie jest przyjąć notację Voighta:  $11 \rightarrow 1$ ,  $22 \rightarrow 2$ ,  $33 \rightarrow 3$ ,  $23 \rightarrow 4$ ,  $13 \rightarrow 5$ ,  $12 \rightarrow 6$ . Stałe sztywności trzeciego rzędu, uzyskane za pomocą pomiarów prędkości rozchodzenia się fal sprężystych, zob. np. Drabble i Brammer (1966); Walker i in. (1985), bądź za pomocą symulacji metodą dynamiki molekularnej, zob. np. Garg i in. (1978), dla miary odkształcenia Greena ( $m = 2$ ), przeliczono

względem innych miar odkształcenia według następujących relacji, zob. (4.91) i (4.92),

$$\begin{aligned}
\hat{C}'_{111} &= \hat{C}_{111} + (m - m') 3 \hat{c}_{11}, \\
\hat{C}'_{112} &= \hat{C}_{112} + (m - m') \hat{c}_{12}, \\
\hat{C}'_{123} &= \hat{C}_{123}, \\
\hat{C}'_{144} &= \hat{C}_{144} + (m - m') \frac{1}{2} \hat{c}_{12}, \\
\hat{C}'_{155} &= \hat{C}_{155} + (m - m') \left[ \hat{c}_{44} + \frac{1}{4} \hat{c}_{12} + \frac{1}{4} \hat{c}_{11} \right], \\
\hat{C}'_{456} &= \hat{C}_{456} + (m - m') \frac{3}{4} \hat{c}_{44},
\end{aligned} \tag{4.94}$$

gdzie  $m$  i  $m'$  są współczynnikami rozpatrywanych miar odkształceń (4.84). Za pomocą (4.94) stałe sztywności kryształów składowych heterostruktury CdTe/ZnTe/GaAs, a także germanu i krzemu podano w Tab.4.2.1. Ponieważ w pracy zastosowano miarę logarymiczną odkształceń (zob. (4.84) przy  $m=0$  i (4.85)) stałe sztywności przeliczono z miary odkształceń Greena do logarymicznej miary odkształceń, zob. również Tab.2.1.

Ponieważ przedstawiony powyżej wzór (4.89) na postać energii swobodnej odnosi się do kryształu bez defektów sieci krystalicznej, stałe  $\hat{c}^{ijkl}$  oraz  $\hat{C}^{ijkl}$  zastąpiono stałymi  $\hat{c}_{\alpha}^{ijkl}$  oraz  $\hat{C}_{\alpha}^{ijkl}$ , określonymi poprzez zależności (4.71) oraz (4.72). Energia swobodna, po odrzuceniu członów rzędu wyższego niż trzy, uzyskuje wtedy postać

$$\psi(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) = \frac{1}{\hat{\rho}} \left[ \frac{1}{2!} \hat{c}_{\alpha}^{ijkl} \hat{\varepsilon}_{ij} \hat{\varepsilon}_{kl} + \frac{1}{3!} \hat{C}_{\alpha}^{ijklmn} \hat{\varepsilon}_{ij} \hat{\varepsilon}_{kl} \hat{\varepsilon}_{mn} \right]. \tag{4.95}$$

Stąd, wstawiając (4.95) do (4.85), otrzymano

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{R}_e \left[ \hat{\mathcal{A}} : (\hat{\mathbf{c}}_{\alpha} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{1}{2} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} : \hat{\mathbf{C}}_{\alpha} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) \right] \mathbf{R}_e^T \det \mathbf{F}_e^{-1}. \tag{4.96}$$

We wzorze (4.95) energia swobodna zależy nie tylko od lokalnej wartości tensora  $\mathbf{F}_e$ , ale również od gradientu tego pola. Kontynualne teorie dyslokacji mogą być, z tego powodu, zakwalifikowane do grupy teorii gradientowych, a więc posiadających długość charakterystyczną.

### 4.3 Analiza numeryczna

Najczęściej stosowaną metodą symulacji numerycznych w mechanice materiałów jest metoda elementów skończonych, zob. Crisfield (1997); Belytschko i in. (2000). Przeprowadzono analizę zaprezentowanych wcześniej struktur (Rys. 3.1 oraz Rys. 3.2) na podstawie zaprezentowanych w rozdziale trzecim dystorsji sieci. Obszary rdzeni dyslokacji

modelowano jako ośrodek ciągły, ale o innych własnościach mechanicznych, niż ośrodek w pozostałym obszarze. Poniżej przedstawiono metodę przejścia od obrazu mikroskopowego struktury, poprzez generację danych wejściowych, do wyznaczenia rozkładu naprężeń w strukturze.

Zastosowany w pracy kod numeryczny wzorowany był na procedurach P. Wriggersa dla izotropowych, nieliniowych, hipersprężystych, płaskich elementów sprężystych. Następnie, rozwijany przez promotora niniejszej pracy wraz z H. Antunezem i P. Rodzikiem (Dłużewski i Antúnez, 1995; Dłużewski, 1996; Dłużewski i Rodzik, 1998), przystosowany został do symulacji ruchu dyslokacji. Wreszcie, wykorzystując program FEAP v. 7.1 autorstwa zespołu R. L. Taylora, znalazł zastosowanie do modelowania heterostruktur. W ramach niniejszej pracy, wraz z promotorem, autor opracował procedury wyznaczania naprężeń dla miary Greena-Lagrange'a w anizotropowym ośrodku sprężystym zawierającym dyslokacje. Polem źródłowym naprężeń residualnych jest pole dystorsji sieci otrzymane na podstawie analizy obrazu mikroskopowego metodą fazy geometrycznej (zob. rozdz. 4). W dalszym etapie kod numeryczny został rozwinięty przez mgra Grzegorza Jurczaka, który rozszerzył go o procedury umożliwiające obliczanie pola naprężeń dla anizotropowego ośrodka hipersprężystego opartego na ogólnej mierze odkształceń, zob. zależność (4.84). W niniejszej pracy do wyznaczania naprężeń wykorzystano logarytmiczną miarę odkształceń, ze względu na stabilność algorytmu w zakresie dużych deformacji. Do generowania danych wejściowych MES (generacja siatki elementów, przetwarzanie wartości dystorsji) opracowano niezależny program. Umożliwia on szybką generację danych wejściowych do programu MES poprzez zadanie na obrazie mikroskopowym obszaru, w którym mają być wyznaczone naprężenia. Daje on również możliwość wyboru sposobu ew. uśredniania pola dystorsji. Wszystkie procedury zostały napisane w języku Fortran.

### 4.3.1 Przygotowanie danych wejściowych

Obraz mikroskopowy struktur CdTe/ZnTe/GaAs oraz GaN został zarejestrowany za pomocą kamery cyfrowej. Dystorsje sieci, będące danymi wejściowymi algorytmu numerycznego, mają postać czterech macierzy o wymiarach  $1024 \times 1024$  każda. Odpowiadają one czterem składowym tensora dystorsji sieci. Dodatkowo, dana jest jedna macierz o wymiarach  $1024 \times 1024$ , w której zapisano rozkład składników warstwy epitaksjalnej. Metoda wyznaczenia ostatniej macierzy nie jest tak dokładna, jak sposób pomiaru dystorsji sieci. Polega ona na maksymalnie precyzyjnym określeniu rozkładu poszczególnych składników, poprzez analizę zmian kontrastu, położenia defektów i zaburzeń sieci na obrazie mikroskopowym. W procedurze ich wyznaczania zakłada się periodycz-



ność obrazka (transformata Fouriera), a tym samym maska przykładana do obrazu na brzegach, wystając na zewnątrz nakładana jest na brzeg przeciwnieległy. Zastosowany sposób wyznaczenia dystorsji sieci wymaga więc odrzucenia dystorsji znajdujących się na brzegach rozpatrywanej próbki. Aby wyeliminować tę niedogodność pominięto obszary brzegu próbek. Naprężenia wyznaczono dla obszarów zaznaczonych na Rys. 4.8(a) oraz Rys. 4.11(a). Ze względu na bardzo dużą rozdzielczość obrazu, której nie można odtworzyć przyporządkowując każdy z pikseli danych węzłowi siatki elementu skończonego, wykonano uśrednienie wartości dystorsji. Wartości dystorsji w węzłach narożnych każdego z elementów uzyskano przyporządkowując każdemu z nich wartość średniej z wartości: dystorsji w punkcie pokrywającym się z węzłem oraz dystorsji w sąsiednich punktach pomiaru. Pojedynczą daną wejściową, którą przyporządkowano punktowi w węzle narożnym siatki była średnia z dziewięciu punktów pomiarowych.

Dla struktury CdTe/ZnTe/GaAs przyjęto komórki siatki o wymiarze 9 pikseli  $\times$  9 pikseli, co odpowiada <sup>(6)</sup> 0.288 nm. Wyznaczone średnie dystorsje przypisano węzłom narożnym w siatce elementów skończonych, a wartości dystorsji wewnątrz elementu wyznaczone z zależności

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1,4} N_i^\beta(\mathbf{x}) \hat{\boldsymbol{\beta}}_i, \quad (4.97)$$

gdzie  $N_i^\beta$  są funkcjami interpolującymi wartości dystorsji wewnątrz elementu na podstawie wartości dystorsji węzłowych  $\hat{\boldsymbol{\beta}}_i$ . Podobnie dla przemieszczeń

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1,9} N_i^u(\mathbf{x}) \mathbf{u}_i, \quad (4.98)$$

przy czym  $N_i^u$  są funkcjami interpolującymi wartości przemieszczeń wewnątrz elementu na podstawie wartości przemieszczeń węzłowych  $\mathbf{u}_i$ . Ważną cechą zastosowanej metody numerycznej jest to, że funkcje interpolujące wewnątrz elementu są różne dla dystorsji i przemieszczeń. Dla przemieszczeń są bikwadratowe, natomiast dla dystorsji biliniowe, co jest zgodne z zależnościami pomiędzy nimi, zob. (4.33). W opisie deformacji sieci zastosowano uaktualniony opis Lagrange'a. Wstawiając (4.38) do (4.41), otrzymano

$$\mathbf{F}_o = [\hat{\boldsymbol{\beta}}_H + \mathbf{1}]^{-1} \mathbf{F}_{ch}^{-1}, \quad (4.99)$$

a po odwróceniu

$$\mathbf{F}_o^{-1} = [\hat{\boldsymbol{\beta}}_H + \mathbf{1}] \mathbf{F}_{ch}. \quad (4.100)$$

Korzystając z (4.30)<sub>2</sub> uzyskano

$$\mathbf{F}_e = \mathbf{F} \mathbf{F}_o^{-1}. \quad (4.101)$$

<sup>6</sup>odległość pomiędzy pikselami kamery cyfrowej odpowiada odległości 0.03201 nm w heterostrukturze CdTe/ZnTe/GaAs.

Zależność (4.101), na podstawie (4.43), można przedstawić *explicite*

$$\mathbf{F}_e = [\mathbf{1} - \text{grad } \mathbf{u}] [\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{H}} + \mathbf{1}] \mathbf{F}_{\text{ch}}. \quad (4.102)$$

Na podstawie powyższego wzoru, dla danych dystorsji, wyznaczono tensor deformacji sprężystej. Poprzez powiązanie tensora deformacji sprężystej z tensorem naprężeń Cauchy'ego wyznaczono przemieszczenia  $\mathbf{u}$  odpowiadające konfiguracji równowagowej.

### 4.3.2 Algorytm metody elementów skończonych

Algorytm odpowiada rozwiązaniu następującego równania równowagi

$$\text{div } \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad (4.103)$$

gdzie, zgodnie z omówionymi wcześniej zależnościami, tensor naprężeń Cauchy'ego jest nieliniową funkcją  $\mathbf{u}$ ,  $\nabla \mathbf{u}$ ,  $\boldsymbol{\beta}$  i  $\nabla \boldsymbol{\beta}$ . Mnożąc powyższe równanie przez wariację przemieszczeń i całkując po objętości otrzymano

$$\int_v \delta \mathbf{u} \text{ div } \boldsymbol{\sigma} \, dv = \mathbf{0}. \quad (4.104)$$

Stosując dalej regułę całkowania przez części

$$\int_v [\text{div}(\delta \mathbf{u} \boldsymbol{\sigma}) - \nabla(\delta \mathbf{u})] \boldsymbol{\sigma} \, dv = \mathbf{0} \quad (4.105)$$

i wykorzystując twierdzenie Gaussa przekształcono całkę po objętości na całkę po powierzchni

$$\int_s \delta \mathbf{u} \boldsymbol{\sigma} \, ds - \int_v \nabla(\delta \mathbf{u}) \boldsymbol{\sigma} \, dv = \mathbf{0}. \quad (4.106)$$

Następnie wprowadzono funkcję wagową  $\delta u = N_k^u \delta u^k$ , gdzie  $k$  jest indeksem zastosowanym do oznaczania węzłów elementu, w których określone są przemieszczenia. Funkcja  $N_k^u$  jest funkcją lokalną w elemencie, tj. jest określona dla każdego elementu osobno. Zastąpiono więc kontinuum z nieskończoną ilością zmiennych dyskretnym zbiorem punktów, w których wartości są zmiennymi. Wzór (4.106) przyjmuje postać

$$\int_s N_k^u \delta \mathbf{u}^k \boldsymbol{\sigma} \, ds - \int_v \nabla(N_k^u \delta \mathbf{u}^k) \boldsymbol{\sigma} \, dv = \mathbf{0}, \quad (4.107)$$

a po wyłączeniu wariacji przemieszczeń poza obie całki

$$\left[ \int_s N_k^u \boldsymbol{\sigma} \, ds - \int_v \nabla N_k^u \boldsymbol{\sigma} \, dv \right] \delta \mathbf{u}^k = \mathbf{0}. \quad (4.108)$$

Wariacja przemieszczeń może przyjmować dowolne wartości, więc spełnienia powyższego równania dla każdej  $\delta u^k$  zachodzi

$$\int_s N_k^u \boldsymbol{\sigma} ds - \int_v \nabla N_k^u \boldsymbol{\sigma} dv = \mathbf{0}. \quad (4.109)$$

Oznaczając siły obciążenia zewnętrznego jako

$$\mathbf{f}_k = \int_s N_k^u \boldsymbol{\sigma} ds, \quad (4.110)$$

układ równań algebraicznych metody elementów skończonych można zapisać w formie

$$\mathbf{P}(u) = \mathbf{f}. \quad (4.111)$$

Macierz styczna dana jest jako różniczka drugiego członu równania (4.109) tj.

$$K_{km} = \frac{\partial P_k}{\partial u_m} = \frac{\partial}{\partial u_m} \int_v \nabla N_k^u \boldsymbol{\sigma} dv. \quad (4.112)$$

Zależność tą przekształcono w sposób następujący

$$\begin{aligned} K_{km} &= \frac{\partial}{\partial u_m} \int_V \nabla N_k^u \boldsymbol{\sigma} \frac{dv}{dV} dV & (4.113) \\ &= \int_V \frac{\partial(\nabla N_k^u \boldsymbol{\sigma} \frac{dv}{dV})}{\partial u_m} dV \\ &= \int_v \frac{\partial(\nabla N_k^u \boldsymbol{\sigma} \det \mathbf{F})}{\partial u_m} \det \mathbf{F}^{-1} dv \\ &\approx \int_v \nabla N_k^u \frac{\partial(\boldsymbol{\sigma} \det \mathbf{F})}{\partial u_m} \det \mathbf{F}^{-1} dv. & (4.114) \end{aligned}$$

Dystorsje sieci wpływają na rozwiązanie poprzez tensor naprężeń  $\boldsymbol{\sigma}$ , tj. poprzez wzory (4.84) i (4.96) oraz  $\mathbf{F}_e = \mathbf{F} \mathbf{F}_o^{-1}$ . Układ równań rozwiązywany był metodą Newtona-Raphsona, przy zadanym i ustalonym rozkładzie dystorsji. Wartości tych dystorsji odniesiono do punktów całkowania poprzez funkcje kształtu dla dystorsji  $N_k^\beta$ , dla  $k = 1, 2, 3, 4$ , zob. (4.97).

Dla określenia rozkładu przestrzennego tensora stałych sztywności (4.71) oraz (4.72), w zależności od położenia dyslokacji, niezbędne było wyznaczenie tensorowego pola gęstości dyslokacji. Stałe sztywności wykorzystano do wyznaczenia naprężeń poprzez równanie (4.96). We wzorze tym wirowość pola wyznaczana jest w konfiguracji odniesienia, podczas gdy w algorytmie wszystkie wielkości są wyznaczone w konfiguracji

aktualnej. Przekształcając wzór (4.55) do postaci, w której można wyznaczyć gradienty pól w konfiguracji aktualnej

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}^{KN} &= F_{\circ L,S}^K e^{LSR} F_{\circ R}^N \det \mathbf{F}_{\circ}^{-1} \\ &= -F_{\circ L,S}^K e^{LRS} F_{\circ R}^N \det \mathbf{F}_{\circ}^{-1} \\ &= -F_{\circ L,k}^K F_{e P}^k F_{\circ S}^P F_{\circ R}^N e^{LRS} \det \mathbf{F}_{\circ}^{-1}\end{aligned}$$

i wykorzystując, że

$$F_{\circ M}^{-1L} e^{NPM} = F_{\circ R}^N F_{\circ S}^P e^{LRS} \det \mathbf{F}_{\circ}^{-1}, \quad (4.115)$$

uzyskano

$$\hat{\alpha}^{KN} = -F_{\circ L,k}^K F_{e P}^k F_{\circ M}^{-1L} e^{NPM}. \quad (4.116)$$

Równanie (4.116), ze względu na zależność

$$-F_{\circ L,k}^K F_{\circ M}^{-1L} = -F_{\circ L}^K F_{\circ M,k}^{-1L}, \quad (4.117)$$

można zapisać w innej postaci

$$\hat{\alpha}^{KN} = -F_{\circ L}^K F_{\circ M,k}^{-1L} F_{e P}^k e^{NMP} \quad (4.118)$$

lub

$$\hat{\alpha}^{KN} = -F_{\circ L}^K F_{\circ M,k}^{-1L} F_{e P}^T{}^k e^{NMP}. \quad (4.119)$$

Wstawiając (4.99) do ostatniego równania otrzymano poszukiwaną zależność na tensor gęstości dyslokacji

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{F}_{\text{ch}}^{-1} [\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{H}} + \mathbf{1}]^{-1} \text{grad} [(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{H}} + \mathbf{1}) \mathbf{F}_{\text{ch}}] \times [(\mathbf{1} - \text{grad } \mathbf{u})^{-1} (\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{H}} + \mathbf{1}) \mathbf{F}_{\text{ch}}]^T, \quad (4.120)$$

w której występują operatory pola w konfiguracji aktualnej, natomiast „ $\times$ ” oznacza iloczyn wektorowy po pierwszym wskaźniku i skalarny po drugim. Wzór ten został zaimplementowany w algorytmie metody elementów skończonych.

W rozważanym zagadnieniu płaskiego stanu odkształceń kąt obrotu  $\varphi$ , w odniesieniu do idealnej sieci krystalograficznej, wyznaczono z zależności

$$\varphi = \arctg \frac{R_{e 21}}{R_{e 11}}, \quad (4.121)$$

gdzie tensor obrotu  $\mathbf{R}_e$ , wynikający z rozkładu polarnego tensora  $\mathbf{F}_e = \mathbf{R}_e \mathbf{U}_e$ , ma postać

$$[\mathbf{R}_e] = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (4.122)$$

### 4.3.3 Wyniki numeryczne

**Struktura CdTe/ZnTe/GaAs.** Naprężenia w strukturze CdTe/ZnTe/GaAs wyznaczono dla obszaru zaznaczonego na Rys. 4.8(a), co odpowiada obszarowi  $970 \times 940$  pikseli na obrazie mikroskopowym. Ze względu na właściwość metody fazy geometrycznej w analizie pominięto dystorsje sieci w pobliżu brzegu obrazu mikroskopowego. Przyporządkowując jeden element skończony obszarowi  $9 \times 9$  pikseli na obrazie mikroskopowym otrzymano plik wejściowy zawierający 11128 elementów i 44935 węzłów. Zadanie rozwiązano na standardowym komputerze PC i wymagało ono, wraz z zapotrzebowaniem systemu operacyjnego, około 1 Gb pamięci operacyjnej. Osiągnięcie konfiguracji równowagowej zajmowało, w zależności od procesora, dwie do dziesięciu godzin. Przyjęto następujące stałe sztywności (wszystkie wartości w GPa):

#### dla GaAs

**stałe drugiego rzędu**  $C_{11} = 119.0$ ,  $C_{12} = 53.8$ ,  $C_{44} = 59.5$  (Tu i in., 1992),

**stałe trzeciego rzędu**  $C_{111} = 39.0$ ,  $C_{112} = -294.4$ ,  $C_{123} = -4.0$ ,  $C_{144} = -16.2$ ,  
 $C_{166} = -114.6$ ,  $C_{456} = 20.3$  (Drabble i Brammer, 1966, po przeliczeniu według wzorów (4.94));

#### dla CdTe

**stałe drugiego rzędu**  $C_{11} = 53.7$ ,  $C_{12} = 37.3$ ,  $C_{44} = 16.4$  (Walker i in., 1985),

**stałe trzeciego rzędu**  $C_{111} = 111.0$ ,  $C_{112} = -136.0$ ,  $C_{123} = -42.0$ ,  $C_{144} = 51.0$ ,  
 $C_{166} = 12.5$ ,  $C_{456} = 29.0$  (Walker i in., 1985, po przeliczeniu według wzorów (4.94));

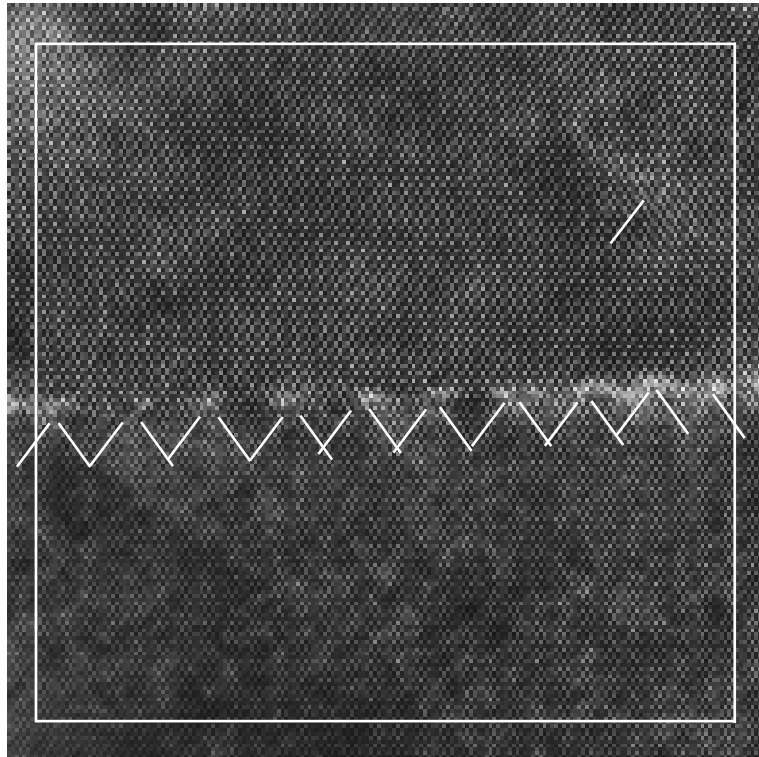
#### dla ZnTe

**stałe drugiego rzędu**  $C_{11} = 71.1$ ,  $C_{12} = 40.7$ ,  $C_{44} = 31.3$  (Lee, 1970),

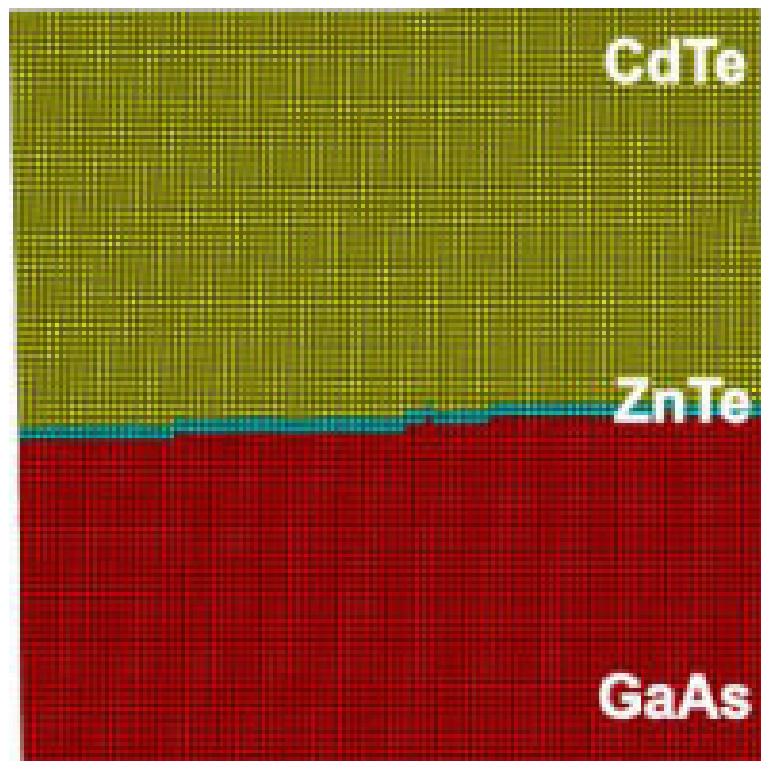
**stałe trzeciego rzędu**  $C_{111} = 350.6$ ,  $C_{112} = -313.6$ ,  $C_{123} = -71.0$ ,  $C_{144} = 216.7$ ,  
 $C_{166} = -177.5$ ,  $C_{456} = 198.0$  (Garg i in., 1978, po przeliczeniu również według wzorów (4.94)).

Parametr osłabienia sztywności  $r$  we wzorach (4.71) i (4.72), zgodnie z argumentacją przedstawioną w paragrafie 4.2.1, przyjęto jako równy 20, zob. także Rys. 4.5. Rozkład przestrzenny tego parametru przedstawiono na Rys. 4.9(a). Rozkład przestrzenny poszczególnych składników heterostruktury został wyznaczony w sposób uproszczony i nie może on być uznany za pomiar w pełni wiarygodny. Warunki brzegowe przyjęto w postaci brzegów swobodnych, zapewniono jedynie statyczną wyznaczalność układu,

poprzez zablokowanie przemieszczeń skrajnych węzłów: lewego dolnego w obu kierunkach i prawego dolnego w kierunku pionowym. Dzięki przyjęciu takich warunków brzegowych naprężenia w strukturze były mniej wrażliwe na wystąpienie niedokładności w wyznaczeniu rozkładu przestrzennego składników heterostruktury. Warunki brzegowe w postaci brzegów swobodnych pozwoliły więc na częściowe zniwelowanie ewentualnych błędów w przyjętym rozkładzie przestrzennym składników heterostruktury. Rozkład poszczególnych składowych tensora naprężeń Cauchy'ego został przedstawiony na Rys. 4.9 i Rys. 4.10.

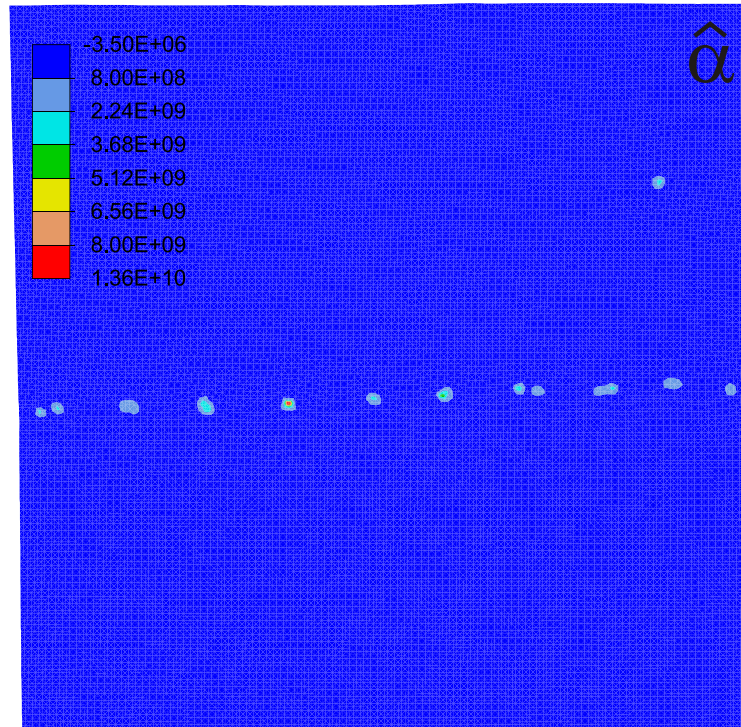


(a) Obszar, dla którego wyznaczono naprężenia.

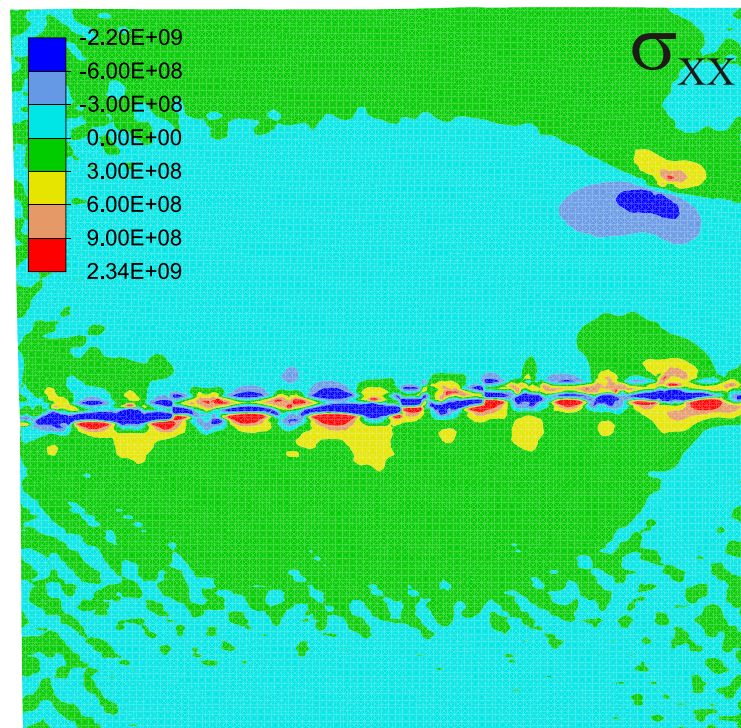


(b) Rozkład poszczególnych składników heterostruktury.

Rysunek 4.8: Struktura CdTe/ZnTe/GaAs.



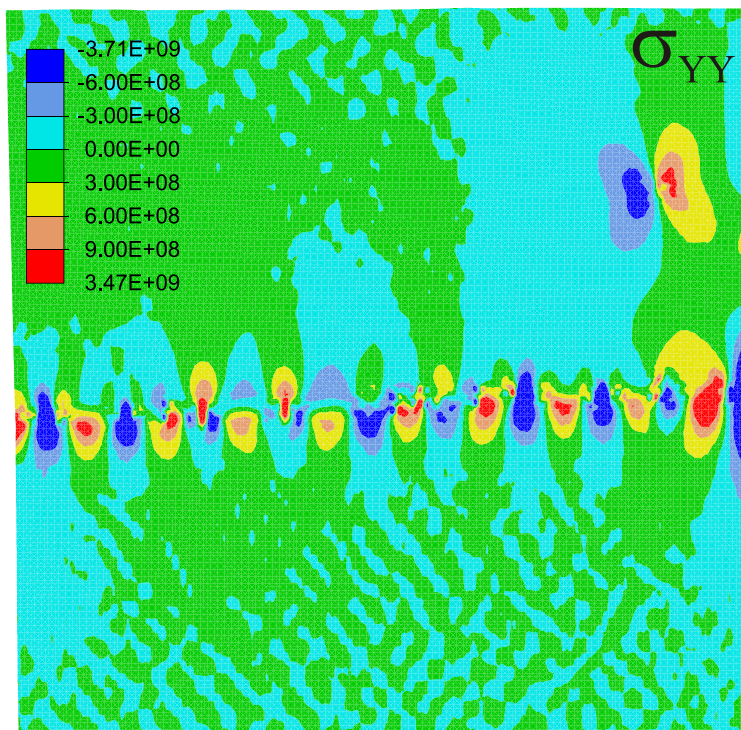
(a) Parametr gęstości dyslokacji – wzór (4.70) [ $1/m^2$ ].



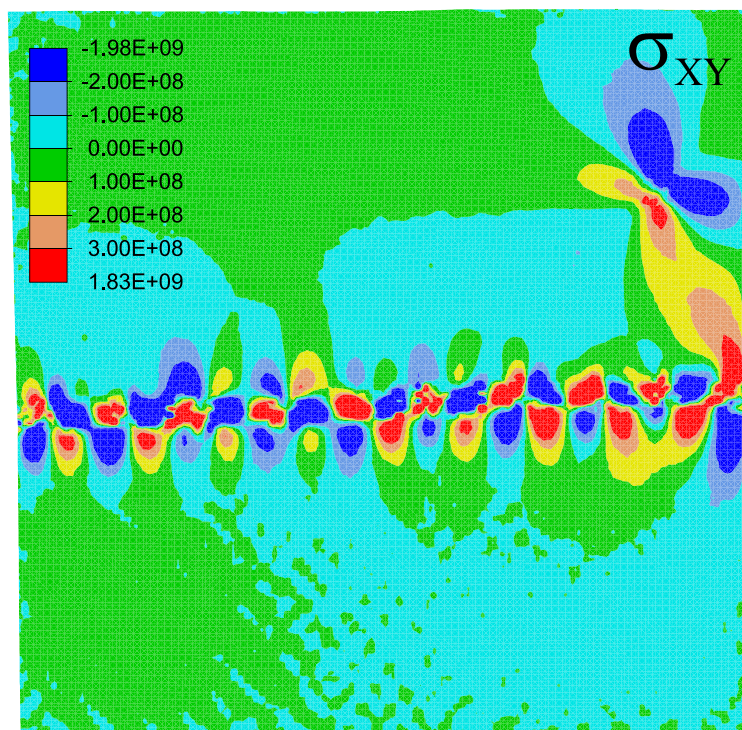
(b) Składowa XX tensora naprężeń [Pa].

Rysunek 4.9: Struktura CdTe/ZnTe/GaAs.





(a) Składowa YY tensora naprężeń [Pa].



(b) Składowa XY tensora naprężeń [Pa].

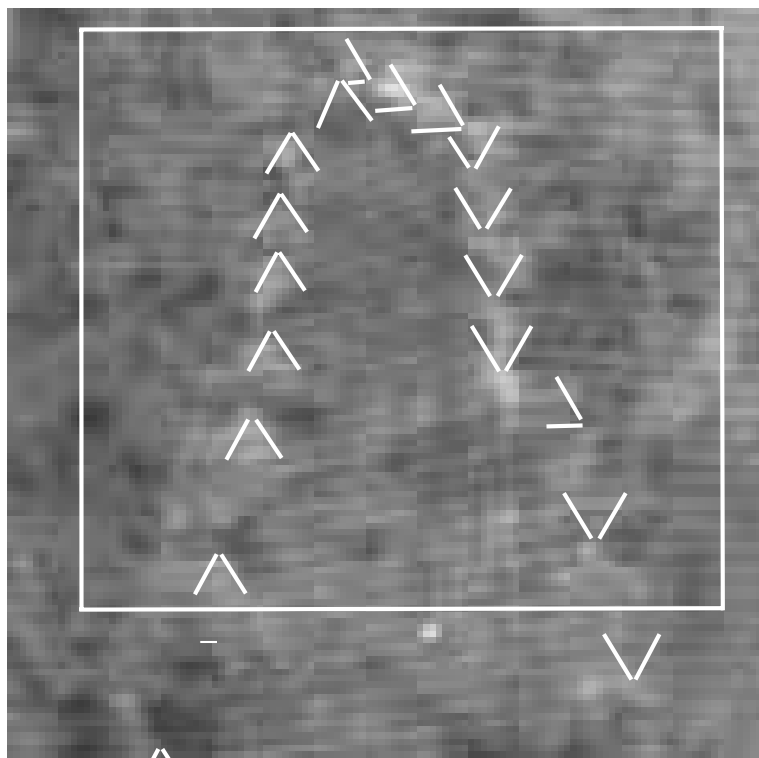
Rysunek 4.10: Naprężenia w heterostrukturze CdTe/ZnTe/GaAs.

**Struktura GaN.** W przypadku GaN, podobnie jak w przypadku poprzedniej struktury, naprężenia wyznaczono tylko dla wybranego podobszaru całego obrazu mikroskopowego, zob. Rys. 4.11(a). W odniesieniu do punktów pomiaru na obrazie mikroskopowym ma on wymiary  $820 \times 800$  pikseli. Jeden element skończony odpowiada obrazowi z kamery cyfrowej o powierzchni  $12 \times 12$  pikseli ( $4.372 \text{ nm} \times 4.372 \text{ nm}$ , <sup>(7)</sup>). Plik wejściowy zadania zawiera 4488 elementów i 18221 węzłów.

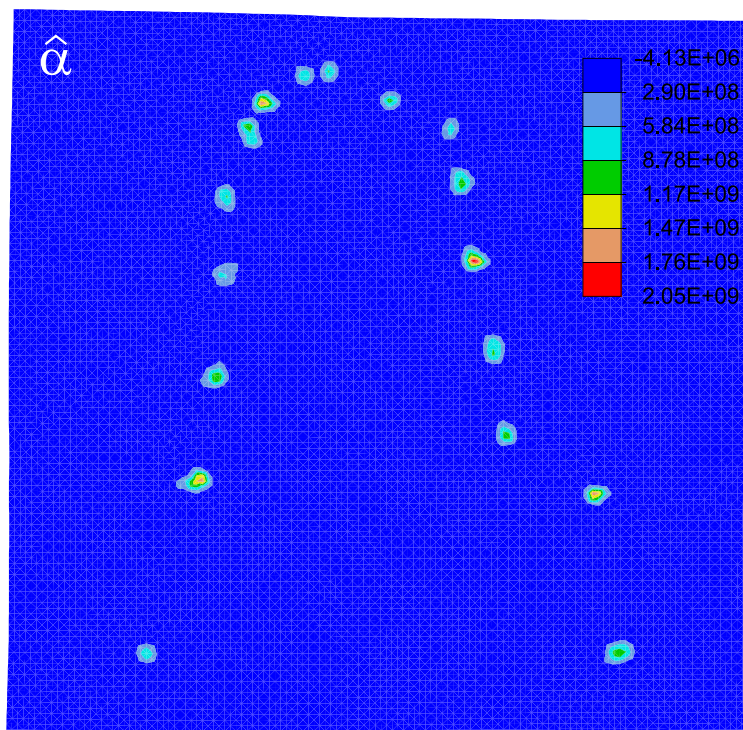
Stałe sztywności przyjęto za Takagi i in. (1996) i wynoszą one  $C_{11} = 374.$ ,  $C_{12} = 106.$ ,  $C_{13} = 70.$ ,  $C_{33} = 379.$ ,  $C_{44} = 101.$  (wartości w GPa). Parametr redukcji sztywności  $r$  zadano równy 60, zob. Rys. 4.6(a). Warunki brzegowe, podobnie jak w przypadku poprzednio rozpatrywanej struktury, przyjęto w postaci brzegów swobodnych. Statyczną wyznaczalność układu zapewniono poprzez zablokowanie przemieszczeń skrajnych węzłów: lewego dolnego w obu kierunkach i prawego dolnego w kierunku pionowym. Rozkład parametru gęstości dyslokacji  $\hat{\alpha}$  przedstawiono na Rys. 4.11(b), natomiast orientację sieci kryształu w odniesieniu do osi  $x$  i  $y$  przedstawiono na Rys. 4.12(a), a składowe naprężenia na Rys. 4.12 i 4.13.

---

<sup>7</sup>Odległość pomiędzy pikselami obrazu z kamery cyfrowej odpowiada w obserwowanej strukturze odległości  $0.36437 \text{ nm}$ .

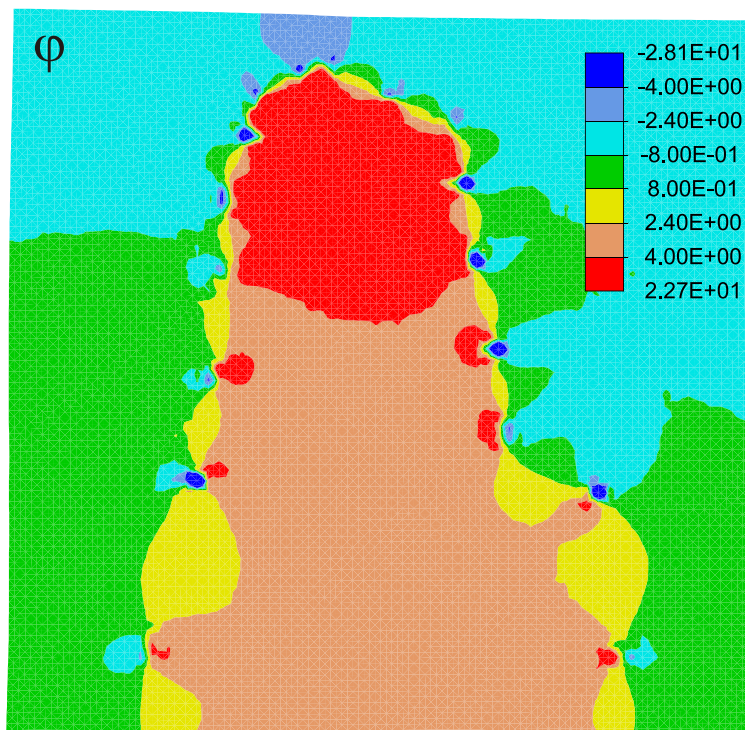


(a) Obszar, dla którego wyznaczono naprężenia.

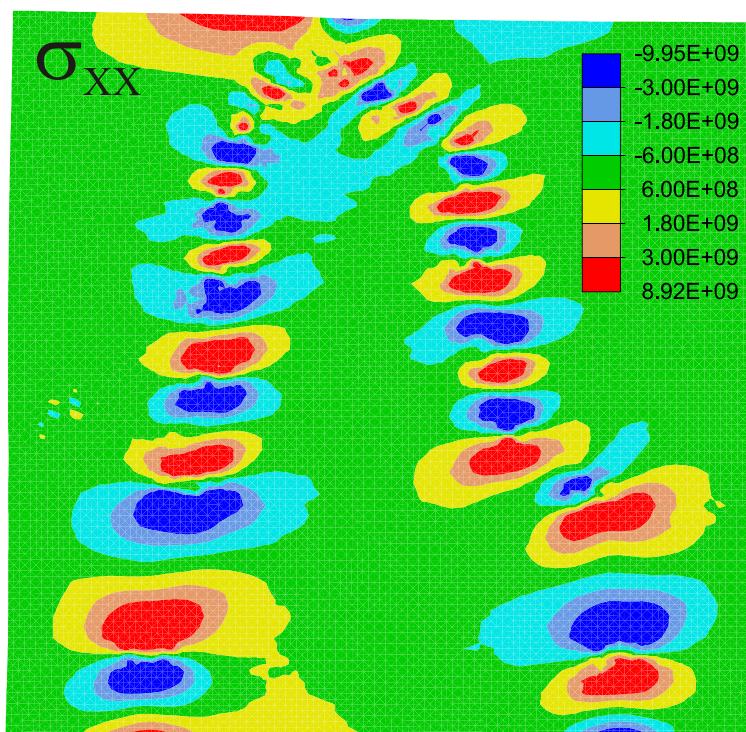


(b) Parametr gęstości dyslokacji – wzór (4.70) [ $1/m^2$ ].

Rysunek 4.11: Struktura GaN.

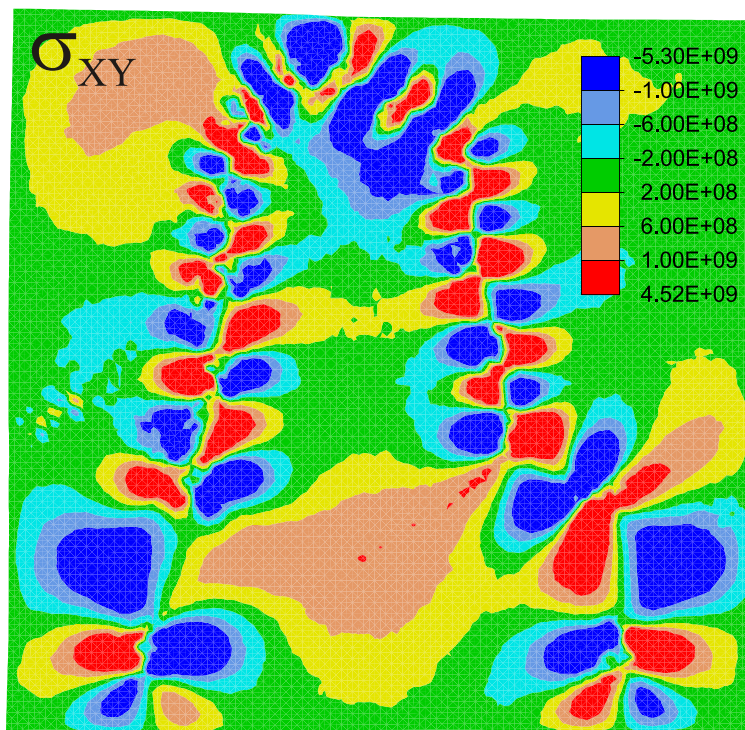


(a) Orientacja sieci kryształu.

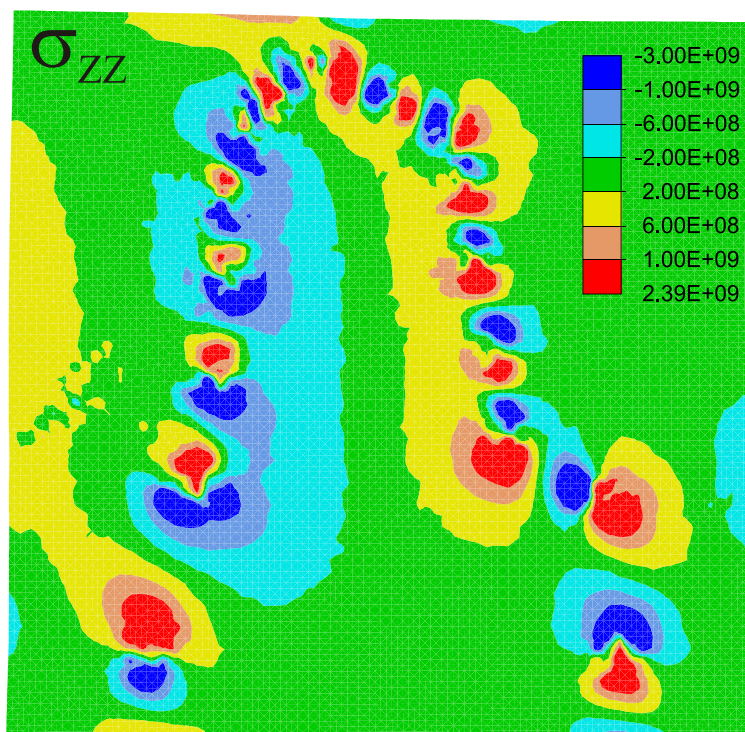


(b) Składowa XX tensora naprężeń Cauchy'ego [Pa].

Rysunek 4.12: Struktura GaN.



(a) Składowa XY tensora naprężeń [Pa].



(b) Składowa ZZ tensora naprężeń [Pa].

Rysunek 4.13: Naprężenia w strukturze GaN.

## 4.4 Dyskusja

**Obraz mikroskopowy i dystorsje.** Na wartości naprężeń w strukturze duży wpływ ma stopień jej zrelaksowania. Można go wyznaczyć przez określenie równowagowej gęstości dyslokacji na długości interfejsu

$$\varrho_d = \left| \frac{1}{a_{\text{warstwy}}} - \frac{1}{a_{\text{podłoża}}} \right|. \quad (4.123)$$

Stąd, odległość pomiędzy dyslokacjami wynosi

$$l = \varrho_d^{-1} = \frac{a_{\text{podłoża}} \cdot a_{\text{warstwy}}}{|a_{\text{podłoża}} - a_{\text{warstwy}}|}. \quad (4.124)$$

Dla heterostruktury CdTe/ZnTe/GaAs,  $a_{\text{podłoża}} = 0.565325$  nm oraz  $a_{\text{warstwy}} = 0.6477$  nm. Wykorzystując (4.124) otrzymano  $l = 4.445$  nm. Długość wektora Burgersa obserwowanych dyslokacji jest równa połowie komórki elementarnej kryształu, więc  $l = 4.43$  nm / 2 = 2.225 nm. Na obrazie mikroskopowym z Rys. 3.1 odległości pomiędzy dyslokacjami wynoszą  $l = (2.0 \text{ do } 2.5)$  nm. Wartości wyznaczone z punktu widzenia niezbędności geometrycznej oraz obserwowane są więc w przybliżeniu równe. Można było tego oczekiwać wobec braku innych defektów struktury. Układ taki wyraźnie się różni od układu przedstawionego w pracy Cheng i in. (1995), gdzie kryształ CdTe wzrastał na kryształ GaAs bez warstwy buforowej. W pracy tej zaobserwowano  $6^\circ$  dezorientację pomiędzy sieciami podłoża i warstwy. Przykłady wzrostu dwóch podobnych do struktury z Rys. 3.1 struktur, tj: CdTe/GaAs oraz ZnTe/GaAs przedstawiono w pracy Schwartzman i Sinclair (1991). Zaprezentowana tam analiza dotyczy stabilności konfiguracji defektów powstających podczas wzrostu heterostruktury oraz mechanizmów powodujących przejście od nierównowagowej konfiguracji dyslokacji (tuż po wzroście) do równowagowej (po wyżarzeniu). Tuż po zakończeniu wzrostu obie struktury zawierały dyslokacje  $60^\circ$  oraz częściowe dyslokacje Shockley'a i błędy ułożenia, zob. Rys. 3, 10, 15 w/w pracy. Po wyżarzeniu autorzy otrzymali równomiernie rozmieszczone dyslokacje niedopasowania. Odległości pomiędzy dyslokacjami wynosiły odpowiednio  $3.1 \pm 0.2$  nm – dla heterostruktury CdTe/GaAs oraz  $5.6 \pm 0.4$  nm – dla heterostruktury ZnTe/GaAs. Proces przejścia do konfiguracji równowagowych dyslokacji autorzy uzasadnili połączeniem par dyslokacji  $60^\circ$ . Reakcja ta nastąpiła poprzez łączenie się dyslokacji  $60^\circ$  wzdłuż interfejsu. Obserwacje te potwierdzają tezę, że istotną rolę w możliwości uzyskania dobrze zrelaksowanych struktur odgrywa zapewnienie dobrej mobilności dyslokacji poprzez dostarczenie energii niezbędnej do połączenia się par dyslokacji  $60^\circ$ . Brak par dyslokacji  $60^\circ$  w próbce CdTe/ZnTe/GaAs z Rys. 3.1 (poza dyslokacjami J i K) oraz rozkład dyslokacji przedstawionych na Rys. 3.1 oraz Rys. 3.2 (por. ułożenie dyslokacji w pracy Sharan i Narayan (1989)) wskazuje, że jest ona dobrze zrelaksowana.

Do oceny przydatności metody wyznaczania naprężeń na podstawie dystorsji sieci istotna jest dokładność wyznaczenia tych dystorsji. Hohenstein i Bierwolf oszacowali błąd w wyznaczaniu wartości przemieszczeń atomów na  $2 \times 10^{-4} \times a$ , gdzie  $a$  jest stałą sieciową (Hohenstein i Bierwolf, 1995). Inne oszacowanie dokładności można otrzymać porównując długości wektorów Burgersa wyznaczone na podstawie kontynualnej teorii dyslokacji z długościami wynikającymi z krystalografii. W przypadku struktury z Rys. 3.1, wielkości wektorów Burgersa są zgodne z wartościami tych wielkości z krystalografii, zob. Tab. 4.1. Porównanie takie świadczy o dużej dokładności wyznaczenia dystorsji sieci.

**Rozkład składników.** W analizowanej strukturze CdTe/ZnTe/GaAs założono, że warstwa buforowa ZnTe ma postać dwóch monowarstw. Naprężenia w strukturze charakteryzują się wysoką niejednorodnością i mogą powodować zmianę rozkładu przestrzennego atomów cynku poprzez dyfuzję. Dyfuzja atomów cynku w pobliżu rdzeni dyslokacji w obszar zajmowany przez CdTe powodowałaby, że wraz ze wzrostem koncentracji cynku występowałby w przybliżeniu liniowy spadek wartości wymiarów sieci oraz sztywności materiału (Farthing i in., 1989). Dyfuzja taka jest więc korzystna energetycznie, ponieważ obecność cynku w warstwie stabilizuje ją, tj. rozkład atomów cynku dostosowuje się do rozkładu przestrzennego dyslokacji. W związku z tym naprężenia, przy uwzględnieniu dyfuzji, miałyby niższe wartości.

Na podstawie obrazu mikroskopowego (Rys. 3.1) oraz dystorsji sieci (Rys. 3.6) bardzo trudno było wyznaczyć rozkład przestrzenny atomów cynku. Ich rozkład wyznaczono na podstawie analizy zmian kontrastu obrazu, położenia defektów i zaburzeń sieci. W analizie numerycznej przyjęto dwie monowarstwy ZnTe. Przeprowadzono również symulacje numeryczne zakładając jedną, pięć i dziesięć monowarstw ZnTe. Symulacje te wykazały, że najbardziej korzystny energetycznie jest przypadek struktury z dwiema monowarstwami ZnTe.

**Warunki brzegowe.** W przypadku obu analizowanych struktur warunki brzegowe zadania numerycznego przyjęto w postaci brzegów swobodnych. Statyczną wyznaczalność zapewniono poprzez utwierdzenie lewego dolnego węzła siatki w obu kierunkach oraz prawego dolnego węzła w kierunku pionowym. Nawet małe niedokładności w wyznaczeniu rozkładu poszczególnych składników, ze względu na duże różnice w stałych sieci składników heterostruktury, wywołują bardzo duże odkształcenia sprężyste. Przyjęcie warunków brzegowych w postaci unieruchomienia wszystkich węzłów brzegowych dla heterostruktury CdTe/ZnTe/GaAs wiązałoby się więc z wywołaniem bardzo wysokich

naprężeń. Inne możliwości przyjęcia warunków brzegowych to m. in.: brzegi próbki bez możliwości przemieszczania się lub brzegi „oklejone” grubą warstwą materiału o takich samych właściwościach mechanicznych. Jak wynika z przeprowadzonych symulacji dla struktury GaN, zablokowanie przemieszczeń brzegów wybranego obszaru wywołuje znaczną zmianę orientacji sieci na brzegach próbki, a jednocześnie poziom naprężeń wewnątrz obszaru nie ulega znaczącej zmianie (wartości naprężeń wokół dyslokacji różnią się nieznacznie – o ok. 10%). Oklejenie warstwą materiału o tych samych właściwościach mechanicznych, podobnie jak w przypadku braku przemieszczeń na brzegach próbki, powodowało zaburzenia orientacji sieci w obszarze brzegu próbki. Takie warunki brzegowe uniemożliwiają analizę naprężeń dla małych obszarów materiału. Wydaje się więc, że przyjęte w pracy warunki brzegowe w obu przykładach obliczeniowych, jakkolwiek niedoskonałe, są optymalnym rozwiązaniem.

**Parametr szerokości rdzeni dyslokacji.** Wprowadzenie tego parametru pozwoliło na uwzględnienie w opisie zaburzenia periodyczności ułożenia atomów w rdzeniach dyslokacji, zob. zależności (4.71) i (4.72). Foreman i in. (1951) wprowadzili podobny parametr, który służył do opisu siły wiązań atomowych w rdzeniach dyslokacji. Wartość parametru wprowadzonego przez tych autorów dobiera się na podstawie wyników eksperymentalnych. Podobnie jest w przypadku wprowadzonego w pracy parametru charakteryzującego szerokość rdzenia dyslokacji. Duże różnice w kształtach rdzeni dyslokacji znacznie utrudniają dobór tego parametru. Jego wartość przyjęto poprzez analizę zasięgu rdzeni dyslokacji, tak jak to przedstawiono na Rys. 4.5 dla struktury CdTe/ZnTe/GaAs oraz na Rys. 4.4 dla struktury GaN. Parametr ten służy do przybliżenia rzeczywistych oddziaływań międzyatomowych i, jak wynika z wzorów (4.71) i (4.72), obniża on stałe sztywności materiału w miejscach zdefektowania sieci krystalicznej.

**Naprężenia.** Opracowany algorytm pozwala na wyznaczenie naprężeń w heterostrukturach z uwzględnieniem naprężeń wywołanych przez pojedyncze dyslokacje niedopasowania. Naprężenia wokół dyslokacji wyznaczane są z uwzględnieniem zarówno nieliniowości geometrycznej jak i fizycznej. Uwzględniono również anizotropię własności mechanicznych. W odróżnieniu od dostępnych w literaturze symulacji numerycznych, różnica stałych sieciowych poszczególnych składników heterostruktury zadawana jest bezpośrednio, a nie poprzez różnicę ich współczynników rozszerzalności cieplnej (por. np. Kret i in., 1999; Tillmann i in., 2000). Pozwala to na dalsze rozwijanie algorytmu w celu uwzględnienia w analizie naprężeń termicznych.

W analizie defektów sieci krystalicznej często zachodzi konieczność uwzględnienia



w opisie pozycji poszczególnych atomów. W obszarach rdzeni dyslokacji wyniki otrzymane przy pomocy metod mechaniki kontinuum mogą się różnić od rzeczywistych, ze względu na różnorodność występujących w nich konfiguracji atomów. Bardziej dokładne wyniki numeryczne można otrzymać za pomocą metod, które uwzględniają dyskretny rozkład atomów w rdzeniach dyslokacji. Istnieją jednak możliwości potwierdzenia zasadności użycia modeli kontynualnych poprzez weryfikacje eksperymentalne. Jednocześnie istnieje wiele zagadnień, dla których wyniki uzyskiwane metodami kontynualnymi zgadzają się z obserwacjami mikroskopowymi (zob. np. Bonnet, 1981; Vila i in., 1996; Bonnet i in., 2000). Zaproponowaną w pracy metodę (podobnie jak metodę Foremana, Jaswona i Wooda) można traktować jako kontynualne przybliżenie rozwiązań ścisłych. Szerokość rdzenia dyslokacji, jak pokazują pomiary eksperymentalne oraz symulacje numeryczne, zależy od modelowanego materiału i dlatego możliwość modyfikacji tej wielkości w modelu pozwala na bardziej adekwatny opis, zob. również uwagi w pracy Duesbery (1989). Wartości naprężeń widocznych na Rys. 4.10 i 4.13 odnoszą się do skali atomowej, gdzie występuje duża zmienność pola przemieszczeń i dlatego są one tak wysokie (por. Nix, 1989). W zaprezentowanej metodzie analiza dotyczy jedynie składowych krawędziowych dyslokacji, w związku z czym naprężenia wywoływane przez składowe śrubowe wektora Burgersa (dyslokacje J oraz K wg. oznaczeń z Rys. 3.1) nie zostały uwzględnione w analizie, ponieważ zastosowano płaski stan odkształceń.

Dzięki uwzględnieniu stałych sztywności wyższego rzędu niż drugi możliwy jest opis takich zjawisk, jak:

- Wzrost objętości materiału spowodowany nukleacją dyslokacji (Freidel, 1964; Sinclair i in., 1978; Anand, 1979; Teodosiu, 1982) zob. Rys. 4.7.
- Zmiana struktury pasmowej, spowodowana naprężeniami hydrostatycznymi, które związane są ze zwiększeniem objętości materiału (zob. Spaepen, 2000; Nag, 2000).

Wyznaczanie stałych sztywności trzeciego rzędu jest obarczone stosunkowo dużym błędem. Wartości wyznaczone przez różnych autorów mogą się różnić nawet znakami (por. Garg i in., 1978; Singh i Singh, 1987). Stałe sztywności trzeciego rzędu dla GaAs oraz CdTe wyznaczone eksperymentalnie dostępne są w literaturze, natomiast dla ZnTe wykorzystano wartości uzyskane za pomocą metod numerycznych. W przypadku struktury GaN analiza została ograniczona do stałych sztywności drugiego rzędu.

Zbudowany do celów pracy algorytm został zmodyfikowany do analizy naprężeń i odkształceń w tzw. supersieciach (zob. Ruterana i in., 2002). Na podstawie analizy odkształceń supersieci możliwe jest wyznaczenie koncentracji jej składników (zob. również Kret i in., 2001).



# Podsumowanie

W ramach niniejszej pracy opracowano nową metodę obliczania rozkładu naprężeń w heterostrukturach. Wykorzystuje ona rozkłady dystorsji sieci zmierzone za pomocą metody fazy geometrycznej.

- Opracowana metoda pozwala na wyznaczenie, na podstawie pola dystorsji sieci, naprężeń w strukturach krystalicznych zawierających dyslokacje.
- Umożliwia ona analizę naprężeń w obszarach rdzeni dyslokacji przy użyciu metod mechaniki kontinuum.
- Stworzone narzędzie, poprzez lepsze ukierunkowanie badań eksperymentalnych, daje możliwość symulacji numerycznej stopnia relaksacji heterostruktur.
- Dużym ograniczeniem tej metody wydaje się fakt, że informacje używane do analizy pochodzą jedynie z dwóch wymiarów próbki. Ograniczenie to wynika z metody pomiaru dystorsji sieci. Analiza nie uwzględnia więc relaksacji struktury w kierunku prostopadłym do obrazu mikroskopowego.
- Metody obliczeniowe wykorzystujące informacje o położeniach poszczególnych atomów wymagają stosunkowo dużych mocy obliczeniowych komputerów, a tym samym nie pozwalają na modelowanie dużych układów atomowych. W przypadku wielu zadań metody kontynualne są wystarczająco dokładne do potrzeb analizy. Przedstawiona metoda wyznaczania naprężeń może być efektywnym uzupełnieniem dla modelowania układu dyskretnych atomów.

# Bibliografia

- Allinson D. L. (1975). Measurement of microstrains in thin epitaxial films. W: Matthews J. W., ed., *Epitaxial Growth*, vol. A, *Materials Science and Technology*, 365–379. Academic Press.
- Amelinckx S., Gevers R., Renaut G. i Van Landuyt J., ed. (1970). *Modern Diffraction and Imaging Techniques in Material Science*. NATO, Sci. Affairs Div., North-Holland, Amsterdam, Netherlands.
- Anand L. (1979). On Hencky approximate strain-energy function for moderate deformations. *Transactions of ASME*, **46**, 78–82.
- Angelo J. E. i Mills M. J. (1995). Investigations of the misfit dislocation structure at a CdTe(001)/GaAs(001) interface using Stillinger-Weber potentials and high-resolution transmission electron microscopy. *Philosophical Magazine A*, **72**(3), 635–649.
- Asai H. i Oe K. (1983). Energy band-gap shift with elastic strain in  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$  epitaxial layers on (001) GaAs substrates. *Journal of Applied Physics*, **54**(4), 2052–2056.
- Atkinson A. i Jain S. C. (1992). The energy of finite systems of misfit dislocations in epitaxial layers. *Journal of Applied Physics*, **72**(6), 2242–2248.
- Atkinson A. i Jain S. C. (1993). A new approach to calculating the energy of systems of misfit dislocations in strained epitaxial layers. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **5**, 4595–4600.
- Ball C. A. B. i Van Der Merwe J. H. (1983). The growth of dislocation-free layers. W: Nabarro F. R. N., ed., *Dislocations in Solids*, vol. 6, rozdz. 27, 121–142. North-Holland.
- Bauer S., Rosenauer A., Link P., Kuhn W., Zweck J. i Gebhardt W. (1993). Misfit dislocations in epitaxial ZnTe/GaAs (001) studied by HRTEM. *Ultramicroscopy*, **51**, 221–227.
- Bauer S., Huber M., Ruth C., Link P. i Gebhardt W. (1994). Strain relaxation in thin ZnTe epilayers on GaAs and ZnSe/GaAs. *Materials Science Forum*, **143**, 531–535.

- Belytschko T., Liu W. K. i Moran B. (2000). *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. John Wiley and Sons Ltd.
- Bensaada A., Chennouf A., Cochrane R. W., Graham J. T., Leonelli R. i Masut R. A. (1994). Misfit strain, relaxation, and band-gap shift in  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}/\text{InP}$  epitaxial layers. *Journal of Applied Physics*, **75**(6), 3024–3029.
- Bonnet R. i Loubradou M. (1994). Atomic positions around misfit dislocations on a planar heterointerface. *Physical Review B*, **49**(20), 14397–14402.
- Bonnet R., Loubradou M. i Dahmen U. (2000). Atomic scale observation of the displacement fields generated by the intrinsic defects of  $(111)\text{Ni}_3\text{Al}/(010)\text{Ni}_3\text{Nb}$  close-packed interfaces. *Philosophical Magazine A*, **80**(10), 2233–2256.
- Bonnet R. (1981). Periodic elastic fields in anisotropic two-phase media. Application to interfacial dislocations. *Acta Metallurgica*, **29**(2), 437–445.
- Bourret A., Desseaux J. i Renault A. (1982). Core structure of the Lomer dislocation in germanium and silicon. *Philosophical Magazine A*, **45**(1), 1–20.
- Boyko V. S., Garber R. I. i Kossevich A. M. (1994). *Reversible Crystal Plasticity*. American Institute of Physics.
- Brantley W. A. i Harrison D. A. (1973). Degradation studies of diffused GaAs electro-luminescent diodes subjected to mechanical stress. W: *Proceedings of the 11th Annual Reliability Physics Conference*, 267–274, New York. IEEE.
- Brantley W. A., Lorimor O. G., Dapkus P. D., Haszko S. E. i Saul R. H. (1975). Effect of dislocations on green electroluminescence efficiency in GaP grown by liquid phase epitaxy. (LED material). *Journal of Applied Physics*, **46**(6), 2629–2637.
- Brugger K. (1964). Thermodynamic definition of higher order elastic coefficients. *Physical Review*, **133**(6A), 1611–12.
- Brune H. i Kern K. (1997). Heteroepitaxial metal growth: The effects of strain. W: King D. A. i Woodruss D. P., ed., *The Chemical Physics of Solids Surfaces*, vol. 8, 149–206. Elsevier.
- Cermelli P. i Sellers S. (1998). On the nonlinear mechanics of Bravais crystals with continuous distributions of defects. *Mathematics and Mechanics of Solids*, **3**(3), 331–358.

- Cheng T. T., Aindow M., Jones I. P., Hails J. E. i Williams D. J. (1995). The role of the initial nucleation stage in microstructural development for CdTe grown on heat-cleaned 2 degrees-off (001) GaAs by metalorganic chemical vapour deposition. *Journal of Crystal Growth*, **154**(3-4), 251–261.
- Christiansen S., Albrecht M., Michler J. i Strunk H. P. (1996). Elastic and plastic relaxation in slightly undulated misfitting epitaxial layers - a quantitative approach by three-dimensional finite element calculations. *Physica Status Solidi A*, **156**(1), 129–150.
- Cibert J., Gobil Y., Dang L. S., Tatarenko S., Feuillet G., Jouneau P. H. i Saminadayar K. (1990). Critical thickness in epitaxial CdTe/ZnTe. *Applied Physics Letters*, **56**(3), 292–294.
- Clark J. C., Jones E. D., Mullin J. B. i Brinkmann A. W. (1995). Time dependence of zink diffusion in bulk CdTe. W: Heinrich H. i Mullin J. B., ed., *II-VI Compounds and Semimagnetic Semiconductors*, vol. 182-184, *Materials Science Forum*, 63–68.
- Crisfield M. A. (1997). *Non-Linear Finite Element Analysis of Solid and Structures*, vol. 1-2. Willey, Chichester.
- Daw M. S. i Baskes M. I. (1984). Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B-Condensed Matter*, **29**(12), 6443–6453.
- De Hosson J. T. M., Groen H. B., Kooi B. J. i Vitek V. (1999). Metal-ceramic interfaces studied with high-resolution transmission electron microscopy. *Acta Materialia*, **47**(15-16), 4077–4092.
- De Witt R. (1981). A view of the relation between the continuum theory of lattice defects and non-Euclidean geometry in the linear approximation. *International Journal of Engineering Science*, **19**(12), 1475–1506.
- Dłużewski P. i Antúnez H. (1995). Finite element simulation of dislocation field movement. *Computer Assisted Mechanics and Engineering Science*, **2**, 141–148.
- Dłużewski P. i Rodzik P. (1998). Elastic eigenstates in finite element modelling of large hyper-elastic deformations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **160**(3-4), 325–335.
- Dłużewski P., Maciejewski G., Jurczak G. i Kret S. (2001). Nonlinear analysis of residual stresses induced by misfit dislocations in epitaxial layers. Złożona do publikacji.

- Dłużewski P., Jurczak G., Maciejewski G., Kret S., Ruterana P. i Nouet G. (2002). Finite element simulation of residual stresses in epitaxial layers. W: *Materials Science Forum - European Conference on Residual Stresses 6*, Coimbra. Przyjęta do druku.
- Dłużewski P. (1996). *Continuum Theory of Dislocations as a Theory of Constitutive Modeling of Finite Elastic-Plastic Deformations*. Habilitations Thesis. IFTR Reports 13/1996, Warsaw.
- Dłużewski P. (2000). Anisotropic hyperelasticity based upon general strain measures. *Journal of Elasticity*, **60**(2), 119–129.
- Drabble J. R. i Brammer A. J. (1966). *Solid State Communications*, **4**(5), 467.
- Drabble J. R. i Fendley J. (1967). *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **28**, 669.
- Drabble J. R. i Gluyas M. (1965). W: Willis R. F., ed., *Lattice Dynamics*, 607. Pergamon Press.
- Ducastelle F. (2000). Electronic structure: From bonding to mechanical properties. W: Lépinoux J., Mazière D., Potikis V. i Saada G., ed., *Multiscale Phenomena in Plasticity: From Experiments to Phenomenology, Modelling and Materials Engineering*, vol. 367, 239–257. NATO ASI, Kluwer Academic Publishers.
- Duesbery M. S. (1989). The dislocation core and plasticity. W: Nabarro F. R. N., ed., *Dislocations in Solids*, vol. 8, 67–173. North-Holland.
- Dunstan D. J. (1997). Strain and strain relaxation in semiconductors. *Journal of Materials Science - Materials in Electronics*, **8**(6), 337–375.
- Ercolessi F., Parrinello M. i Tosatti E. (1988). Simulation of gold in the glue model. *Philosophical Magazine A*, **58**(1), 213–226.
- Farthing L. J., Weihs T. P., Kisker D. W., Krajewski J. J., Tang M. F. i Stevenson D. A. (1989). Hardness and elastic modulus measurements in CdTe and ZnTe thin film and bulk samples and ZnTe-CdTe superlattices. W: Bravman J. C., Nix W. D., Barnett D. M. i Smith D. A., ed., *Thin Films: Stresses and Mechanical Properties*, 123–128, Pittsburgh, Pennsylvania. Materials Research Society.
- Finnis M. W. i Sinclair J. E. (1984). A simple empirical N-body potential for transition metals. *Philosophical Magazine A*, **50**(1), 45–55.

- Flinn P. A. (1989). Principles and applications of wafer curvature techniques for stress measurements in thin films. W: *Thin Films: Stresses and Mechanical Properties*, 41–51, Pittsburgh. Mater. Res. Soc.
- Foreman A. J., Jaswon M. A. i Wood J. K. (1951). Factors controlling dislocation widths. *Proceedings of the Physical Society*, **A64**, 156–163.
- Freidel J. (1964). *Dislocations*, vol. 3, *Solid State Physics*. Pergamon Press.
- Frenkel J. i Kontorova T. (1938). *Physical Z. Soviet*, **13**(1), 1–2.
- Freund L. B. (1990). The driving force for glide of a threading dislocation in a strained epitaxial layer on a substrate. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **38**(5), 657–679.
- Freund L. B. (1996). Some elementary connections between curvature and mismatch strain in compositionally graded thin films. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **44**(5), 723–736.
- Gairola B. K. D. (1979). Nonlinear elastic problems. W: Nabarro F., ed., *Dislocations in Solids*, vol. 1, 223–342. North-Holland.
- Garg V. K., Puri D. S. i Verma M. P. (1978). On the second- and third-order elastic constants of ZnS structure solids. *Physica Status Solidi B-Basic Research*, **87**(1), 401–407.
- Herman M. A. (1987). *Heterozłącza półprzewodnikowe. Fizyka, Technologia, Zastosowania*. PWN, Warszawa.
- Hohenstein M. i Bierwolf R. (1995). High-resolution transmission electron microscopy of (AlGaIn)As quantum systems. W: Ploog K. H., ed., *III-V Quantum System Research*, vol. 11, *IEEE Materials and Devices*. Peter Peregrinus Ltd.
- Hu S. M. (1979). Film-edge-induced stress in substrates. *Journal of Applied Physics*, **50**(1), 4661–4666.
- Hu S. M. (1991a). Misfit dislocations and critical thickness of heteroepitaxy. *Journal of Applied Physics*, **69**(11), 7901–7903.
- Hu S. M. (1991b). Stress-related problems in silicon technology. *Journal of Applied Physics*, **70**(6), R53–80.
- Hull R. i Fischer-Colbrie A. (1987). Nucleation of GaAs on Si: Experimental evidence for a three-dimensional critical transition. *Applied Physics Letters*, **50**(13), 851–853.



- Hýtch M. J., Snoeck E. i Kilaas R. (1998). Quantitative measurement of displacement and strain fields from HREM micrographs. *Ultramicroscopy*, **74**, 131–146.
- Indenbom V. L. i Kaganer V. M. (1990a). X-ray analysis of internal stresses in crystals. i. General equations. *Physica Status Solidi A*, **118**(1), 71–84.
- Indenbom V. L. i Kaganer V. M. (1990b). X-ray analysis of internal stresses in crystals. ii. Lattice distortions due to residual strains in crystals grown from melts. *Physica Status Solidi A*, **122**(1), 97–109.
- Jain S. C. i Hayes W. (1991). Structure, properties and applications of  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  strained layers and superlattices. *Semiconductors Science and Technology*, **6**(7), 547–76.
- Jain S. C., Harker A. H., Atkinson A. i Pinaridi K. (1995). Edge-induced stress and strain in stripe films and substrates: A two-dimensional finite element calculation. *Journal of Applied Physics*, **78**(3), 1630–1637.
- Jain S. C., Willander M. i Maes H. (1996). Stresses and strains in epilayers, stripes and quantum structures of III-V compound semiconductors. *Semiconductors Science and Technology*, **11**, 641–671.
- Jain S. C., Harker A. H. i Cowley R. A. (1997a). Misfit strain and misfit dislocations in lattice mismatched epitaxial layers and other systems. *Philosophical Magazine A*, **75**(6), 1461–1515.
- Jain S. C., Maes H. E. i Pinaridi K. (1997b). Stresses in strained GeSi stripes and quantum structures: Calculation using the finite element method and determination using micro-Raman and other measurements. *Thin Solid Films*, **292**(1-2), 218–226.
- Jain U., Jain S., Atkinson A., Nijs J., Mertens R. P. i Van Overstraeten R. (1993). Energy of arrays of nonperiodic interacting dislocations in semiconductor strained epilayers: Implications for strain relaxation. *Journal of Applied Physics*, **73**(4), 1773–1780.
- Jesser W. A. i Kuhlmann-Wilsdorf D. (1967). On the theory of interfacial energy and elastic strain of epitaxial overgrowths in parallel alignment on single crystal substrates. *Physica Status Solidi A*, **19**, 95–105.
- Jesser W. A. i Van der Merwe J. H. (1989). The prediction of critical misfit and thickness in epitaxy. W: Nabarro F. R. N., ed., *Dislocations in Solids*, vol. 8, 421–460. North-Holland.

- Ji G., Huang D., Reddy U. K., Henderson T. S., Houdre R. i Morkoc H. (1987). Optical investigation of highly strained InGaAs-GaAs multiple quantum wells. *Journal of Applied Physics*, **62**(8), 3366–3373.
- Joyce B. A., Dobson P. J. i Larsen P. K. (1988). Molecular beam epitaxy of III-V compounds. Aspects of growth kinetics and dynamics. vol. 5, *The Chemical Physics of Solid Surfaces and Heterogeneous Catalysis*, 271–307. Elsevier.
- Justo J. F., Bulatov V. V. i Yip S. (1999). Dislocation core reconstruction and its effect on dislocation mobility in silicon. *Journal of Applied Physics*, **86**(8), 4249–4257.
- Kleiber M. (1985). *Metoda Elementów Skończonych w Nieliniowej Mechanice Kontinuum*. Biblioteka Mechaniki Stosowanej. PWN, Warszawa.
- Kret S., Delamarre C., Laval J. Y. i Dubon A. (1998). Atomic-scale mapping of local lattice distortions in highly strained coherent islands of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  by high-resolution electron microscopy and image processing. *Philosophical Magazine Letters*, **77**, 249–256.
- Kret S., Benabbas T., Delamarre C., Androussi Y., Dubon A., Laval J. Y. i Lefebvre A. (1999). High resolution electron microscope analysis of lattice distortions and In segregation in highly strained  $\text{In}_{0.35}/\text{Ga}_{0.65}/\text{As}$  coherent islands grown on GaAs (001). *Journal of Applied Physics*, **86**(4), 1988–1993.
- Kret S., Dłużewski P., Dłużewski P. i Laval J. Y. (2000). On the measurement of dislocation cores distribution in GaAs/ZnTe/CdTe. *Złożona do Philosophical Magazine A*.
- Kret S., Ruterana P., Rosenauer A. i Gerthsen D. (2001). Extracting quantitative information from high resolution electron microscopy. *Physica Status Solidi B-Basic Research*, **227**(1), 247–295.
- Kret S., Dłużewski P., Maciejewski G., Potin V., Chen J., Ruterana P. i Nouet G. (2002). The dislocation of low-angle grain boundaries in GaN epilayers: A HRTEM quantitative study and finite element stress state calculation. *DIAMOND AND RELATED MATERIALS*, **11**(3-6), 910–913.
- Kröner E. (1981). Continuum theory of defects. W: Balian R., Kleman M. i Poiries J. P., ed., *Physics of defects*, 215–315. Nord-Holland, Amsterdam.
- Kuphal E., Pocker A. i Eisenbach A. (1993). Relation between photoluminescence wavelength and lattice mismatch in metalorganic vapor-phase epitaxy InGaAs/InP. *Journal of Applied Physics*, **73**(9), 4599–4604.

- Le K. C. i Stumpf H. (1996). Nonlinear continuum theory of dislocations. *International Journal of Engineering Science*, **34**(3), 339–358.
- Lee B. H. (1970). Elastic constants of ZnTe and ZnSe between 77° – 300°K. *Journal of Applied Physics*, **41**(7).
- Mahajan S. (2000). Defects in semiconductors and their effects on devices. *Acta Materialia*, **48**(1), 137–149.
- Matthews J. W. i Blakeslee A. E. (1974). Defects in epitaxial multilayers. i. Misfit dislocations. *Journal of Crystal Growth*, **27**(1), 118–125.
- Matthews J. W. i Crawford J. L. (1970). Accommodation of misfit between single-crystal films of nickel and copper. *Thin Solid Films*, **5**(3), 187–198.
- Matthews J. W. (1975). Coherent interfaces and misfit dislocations. W: Matthews J. W., ed., *Epitaxial Growth*, vol. B, *Materials Science and Technology*, rozdz. 8, 560–609. Academic Press.
- Meyer J. A., Schmid P. i Behm R. J. (1995). Effect of layer-dependent adatom mobilities in heteroepitaxial metal film growth: Ni/Ru(0001). *Physical Review Letters*, **74**(19), 3864–3867.
- Michler J., Mermoux M., von Kaenel Y., Haouni A., Lucazeau G. i Blank E. (1999). Residual stress in diamond films: Origins and modelling. *Thin Solid Films*, **357**(12), 189–201.
- Nabarro F. R. N. (1947). *Proc. Phys. Soc.*, **59**, 256–272.
- Nag B. R. (2000). *Physics of Quantum Well Devices*, vol. 7, *Solid-State Science and Technology Library*. Kluwer Academic Publishers.
- Nix W. D. (1989). Mechanical properties of thin films. *Metallurgical Transactions A*, **20A**(11), 2217–2245.
- Orders P. J. i Usher B. F. (1987). Determination of critical layer thickness in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}/\text{As}/\text{GaAs}$  heterostructures by X-ray diffraction. *Applied Physics Letters*, **50**(13), 980–983.
- Pashley D. W. (1956). *Advances in Physics*, **5**, 174.
- Peierls R. E. (1940). *Proc. Phys. Soc.*, **52**, 34–37.

- People R. i Bean J. C. (1985). Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  strained-layer heterostructures. *Applied Physics Letters*, **47**(3), 322–334.
- Petruzzello J., Greenberg B. L., Cammack D. A. i Dalby R. (1988). Structural properties of the ZnSe/GaAs system grown by molecular-beam epitaxy. *Journal of Applied Physics*, **63**(7), 2299–2303.
- Pinardi K., Jain U., Jain S. C., Maes H. E. i Van Overstraeten R. (1998). Critical thickness and strain relaxation in lattice mismatched II-VI semiconductor layers. *Journal of Applied Physics*, **83**(9), 4724–4733.
- Raabe D. (1998). *Computational Material Science. The Simulations of Materials and Properties*. Wiley-VCH, Weinheim.
- Rao S., Hernandez C., Simmons J. P., Parthasarathy T. A. i Woodward C. (1998). Green's function boundary conditions in two-dimensional and three-dimensional atomistic simulations of dislocations. *Philosophical Magazine A*, **77**(1), 231–256.
- Royer L. (1928). *Bull. Soc. Fr. Mineral. Crist.*, **51**, 7.
- Ruterana P., Kret S., Vivet A., Maciejewski G. i Dłużewski P. (2002). Composition fluctuation in InGaN quantum wells made from molecular beam or metalorganic vapor phase epitaxial layers. *Journal of Applied Physics*, **91**(11), 8979–8985.
- Schäffler F. (1997). High-mobility Si and Ge structures. *Semiconductors Science and Technology*, **12**, 1515–1549.
- Scheel H. J. (2000). Historical aspects of crystal growth technology. *Journal of Crystal Growth*, **211**(1-4), 62–67.
- Scheerschmidt K., Conrad D., Krimse H., Schneider R. i Neumann W. (2000). Electron microscope characterization of CdSe/ZnSe quantum dots based on molecular dynamics structure relaxations. *Ultramicroscopy*, **81**, 289–300.
- Schwartzman A. F. i Sinclair R. (1991). Metastable and equilibrium defects structure of II-IV/GaAs interfaces. *Journal of Electronic Materials*, **20**(10), 805–814.
- Schwarz K. W. i Chidambarrao D. (1999). Dislocation dynamics near film edges and corners in silicon. *Journal of Applied Physics*, **85**(10), 7198–7208.
- Schwarz K. W. (1999a). Simulation of dislocations on the mesoscopic scale. i. Methods and examples. *Journal of Applied Physics*, **85**(1), 108–119.

- Schwarz K. W. (1999b). Simulation of dislocations on the mesoscopic scale. ii. Application to strained-layer relaxation. *Journal of Applied Physics*, **85**(1), 120–129.
- Seth B. R. (1964). Generalized strain measure with applications to physical problems. W: Reiner M. i D. A., ed., *Second-Order Effects in Elasticity, Plasticity and Fluid Dynamics*, 23–27. Pergamon Press.
- Sharan S. i Narayan J. (1989). Strain-relief mechanisms and nature of misfit dislocations in GaAs/Si heterostructures. *Materials Science and Engineering*, **A113**, 57–63.
- Sharma N., Tricker D., Keast V., Hooper S., Heffernan J., Barnes J., Kean A. i Humphreys C. (2000). The effect of the buffer layer on the structure, mobility and photoluminescence of MBE grown GaN. W: *GaN and Related Alloys 1999*, Warrendale. Materials Research Society, Materials Research Society.
- Shiflet G. J. i Van der Merwe J. H. (1991). Misfit accommodation by steps in cubic materials. *Journal of Electronic Materials*, **20**(10), 785–791.
- Shintani K. (1996). Interaction characteristics of dislocations in strained epitaxial layers. *Journal of Applied Physics*, **79**(1), 179–183.
- Sinclair J. E., Gehlen P. C., Hoagland R. G. i Hirth J. P. (1978). Flexible boundary conditions and nonlinear geometric effects in atomic dislocation modeling. *Journal of Applied Physics*, **49**(7), 3890–3897.
- Singh R. K. i Singh S. (1987). Study of elastic properties and their pressure dependence of zincblende structure semiconductors. *Physica Status Solidi B-Basic Research*, **140**(2), 401–413.
- Snoeck E., Warot B., Ardhuin H., Rocher A., Casanove M. J., Kilaas R. i Hytch (1998). Quantitative analysis of strain field in thin films from HRTEM micrographs. *Thin Solid Films*, **319**, 157–162.
- Spaepen F. (2000). Interfaces and stresses in thin films. *Acta Materialia*, **48**, 31–42.
- Springholz G., Bauer G. i Holy V. (1996). Local surface deformations induced by interfacial misfit dislocations in lattice-mismatched heteroepitaxy of EuTe on PbTe(111). *Surface Science*, **365**(2), 453–460.
- Srivastava D., Menon M. i Cho K. (2001). Computational nanotechnology with carbon nanotubes and fullerenes. *Computing in Science and Engineering*, **3**(4), 42–55.

- Steeds J. W. i Willis J. R. (1979). Dislocations in anisotropic media. W: Nabaro F., ed., *Dislocations in Solids*, vol. 1, rozdz. 2, 143–165. North-Holland.
- Stephenson P. C. L., Radny M. W. i Smith P. V. (1996). A modified Stillinger-Weber potential for modelling silicon surfaces. *Surface Science*, **366**(1), 177–184.
- Stillinger F. H. i Weber T. A. (1985). Computer simulation of local order in condensed phases of Silicon. *Physical Review B*, **31**(8), 5262–5271.
- Stowell M. J. (1975). Defects in epitaxial deposits. W: Matthews J. W., ed., *Epitaxial Growth*, vol. B, *Materials Science and Technology*, rozdz. 5, 437–492. Academic Press.
- Sugo M., Uchida N., Yamamoto A. i Nishioka T. (1989). Residual strains in heteroepitaxial III-V semiconductor films on Si(100) substrates. *Journal of Applied Physics*, **65**(2), 591–595.
- Suzuki T., Takeuchi S. i Yoshinaga H. (1991). *Dislocation Dynamics and Plasticity*, vol. 12, *Materials Science*. Springer-Verlag.
- Tabata A., Benyattou T., Guillot G., Clark S. A., MacDonald J. E., Westwood D. I. i Williams R. H. (1994). Strain relaxation studied by photoluminescence and by double crystal X-ray diffraction measurements in strained InGaAs. *Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology*, **B22**(2-3), 222–226.
- Tadmor E. B., Ortiz M. i Phillips R. (1996). Quasicontinuum analysis of defects in solids. *Philosophical Magazine A*, **73**(6), 1529–1563.
- Takagi Y., Ahart M., Azuhata T., Sota T., Suzuki K. i Nakamura S. (1996). Brillouin scattering study in the GaN epitaxial layer. *Physica B*, **219-220**, 547–549.
- Tao J., Lee L. H. i Bilello J. C. (1991). Non-destructive evaluation of residual stresses in thin films via X-ray diffraction topography methods. *Journal of Electronic Materials*, **20**(10), 819–825.
- Teng D. i Lo Y. H. (1993). Dynamic model for pseudomorphic structures grown on compliant substrates: An approach to extend the critical thickness. *Applied Physics Letters*, **62**(1), 43–45.
- Teodosiu C. (1982). *Elastic Models of Crystal Defects*. Springer-Verlag and Editura Academiei, Berlin and București.

- Tersoff J. (1988). New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. *Physical Review B-Condensed Matter*, **37**(12), 6991–7000.
- Tillmann K., Lentzen M. i Rosenfeld R. (2000). Impact of column bending in high-resolution transmission electron microscopy on the strain evaluation of GaAs/InAs/GaAs heterostructures. *Ultramicroscopy*, **83**(1-2), 111–128.
- Tsong T. T. i Chen C. (1997). Dynamics and diffusion of atoms at stepped surfaces. W: King D. A. i Woodruss D. P., ed., *The Chemical Physics of Solids Surfaces*, vol. 8, 102–148. Elsevier.
- Tu K. N., Mayer J. i Feldman L. C. (1992). *Electronic Thin Film Science for Electrical Engineers and Material Scientists*. Maxwell, New York.
- Van der Merwe J. H. (1963a). Crystal interfaces. part i. Semi-infinite crystals. *Journal of Applied Physics*, **34**(1), 117–122.
- Van der Merwe J. H. (1963b). Crystal interfaces. part ii. Finite overgrowths. *Journal of Applied Physics*, **34**(1), 123–127.
- Van Mieghem P., Jain S. C. i Van Overstraeten R. (1994). Stress relaxation in laterally small strained semiconductor epilayers. *Journal of Applied Physics*, **75**(1), 666–668.
- Vellinga W. P., De Hosson J. T. M. i Vitek V. (1997). Misfit dislocations: An atomistic and elastic continuum approach. *Acta Materialia*, **45**(4), 1525–1534.
- Vila A., Comet A., Morante J. R., Ruterana P., Loubradou M. i Bonnet R. (1996). Structure of 60 degrees dislocations at the GaAs/Si interface. *Journal of Applied Physics*, **79**(2), 676–681.
- Villa A., Cornet A., Morante J. R., Ruterana P., Loubradou M., Bonnet R., Gonzales Y. i Gonzales L. (1995). Atomistic core structure of Lomer dislocation at GaAs/(001)Si interface. *Philosophical Magazine A*, **71**(1), 85–103.
- Vitek V. (1974). Theory of the core structures of dislocations in body-centred-cubic metals. *Crystal Lattice Defects*, **5**(1), 1–34.
- Vitek V. (1976). Computer simulation of the screw dislocation motion in BCC metals under the effect of the external shear and uniaxial stresses. *Proceedings of the Royal Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences*, **352**(1668), 109–124.

- Wagner G., Gottschalch V., Rhan H. i Paufler P. (1989a). Pseudomorphic growth and nucleation of misfit dislocations in the epitaxial system (001) InP/In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As i. Pseudomorphic growth, tetragonal distortion, and lattice relaxation by dislocation nucleation. *Physica Status Solidi A*, **112**(2), 519–531.
- Wagner G., Gottschalch V., Rhan H. i Paufler P. (1989b). Pseudomorphic growth and nucleation of misfit dislocations in the epitaxial system (001) InP/In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As ii. Critical thickness and dislocation motion. *Physica Status Solidi A*, **113**(1), 71–81.
- Walker N. J., Saunders G. A. i Hawkey J. E. (1985). Soft TA nodes and anharmonicity in cadmium telluride. *Philosophical Magazine B-Physics of Condensed Matter Structural Electronic Optical and Magnetic Properties*, **52**(5), 1005–1018.
- Willis J. R., Jain S. C. i Bullough R. (1990). The energy of an array of dislocations: Implications for strain relaxation in semiconductor heterostructures. *Philosophical Magazine A*, **62**(1), 115–129.
- Wolf U., Foiles S. M. i Fischmeister H. F. (1991). Study of misfit dislocations at the interface of weakly bonded metal/metal systems. *Acta Metallurgica et Materialia*, **39**(3), 373–382.
- Yao T., Okada Y., Matsui S. i Ishida K. (1987). The effect of lattice deformation on optical properties and lattice parameters of ZnSe grown on (100) GaAs. *Journal of Crystal Growth*, **81**(1-4), 518–523.
- Zang Y. W. i Bower A. F. (1999). Numerical simulations of island formation in a coherent strained epitaxial thin film system. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **47**, 2273–2297.
- Zienkiewicz O. C. i Taylor R. L. (2000). *The Finite Element Method*, vol. 1-3. Butterworth Heinemann, Oxford.
- Żmija J. (1988). *Otrzymywanie monokryształów*. PWN, Warszawa.



# Spis rysunków

1.1	Obraz struktury CdTe/ZnTe/GaAs – jednej z analizowanych w pracy. . . . .	6
1.2	Schemat dyslokacji niedopasowania w warstwie epitaksjalnej. . . . .	7
1.3	Przykład kropki kwantowej zaczerpnięty, za zgodą autora, z pracy Scherschmidt i in. (2000). . . . .	8
1.4	Schemat warstwy epitaksjalnej przy wysokości warstwy: a) $h < h_{cr}$ ; b) $h \geq h_{cr}$ . . . . .	9
1.5	Składowe wektora Burgersa dyslokacji $60^\circ$ . . . . .	11
2.1	Wpływ dyslokacji na zakrzywienie powierzchni swobodnej; obserwacje mikroskopowe przedstawiono w pracy Springholz i in. (1996). . . . .	16
2.2	Schemat dyslokacji krawędziowej Volterry. . . . .	19
2.3	Schemat rozmieszczenia atomów w modelu Frenkla-Kontorovej. . . . .	21
2.4	Przemieszczenia atomów górnej warstwy w modelu Frenkla-Kontorovej po interpolacji. . . . .	22
2.5	Schemat konfiguracji atomów w modelu Peierlsa-Nabarro. . . . .	23
2.6	Naprężenia ścinające w zmodyfikowanym przez Foremana, Jaswona i Wooda modelu Peierlsa-Nabarro dla różnych szerokości rdzenia dyslokacji. . . . .	24
2.7	Relacja pomiędzy szerokością rdzenia dyslokacji w modelu Foremana, Jaswona i Wooda. . . . .	25
2.8	Schemat powstawania dyslokacji niedopasowania. . . . .	28
2.9	Schemat obszaru niedopasowania warstwy epitaksjalnej wraz z dwiema prostopadłymi grupami dyslokacji. . . . .	32
3.1	Obraz mikroskopowy struktury CdTe/ZnTe/GaAs. Zakończenia płaszczyzn krystalograficznych oznaczono białymi odcinkami. . . . .	42
3.2	Obraz mikroskopowy struktury GaN. Zakończenia płaszczyzn krystalograficznych oznaczono białymi odcinkami. . . . .	43
3.3	Obraz fazowy dla heterostruktury CdTe/ZnTe/GaAs przedstawionej na Rys. 3.1. . . . .	46

3.4	Schemat orientacji kryształu azotku galu wraz z osiami pomiarów przesunięcia fazowego. . . . .	47
3.5	Obraz fazowy dla struktury GaN przedstawionej na Rys. 3.2. . . . .	48
3.6	Pole dystorsji sieci $\beta$ w heterostrukturze CdTe/ZnTe/GaAs wyznaczone metodą fazy geometrycznej. Wartości ekstremalne są zlokalizowane w rdzeniach dyslokacji. Wszystkie składowe tensora dystorsji zostały wyznaczone w odniesieniu do niezdeformowanej sieci arsenku galu. . . . .	49
3.7	Pole dystorsji sieci $\beta$ w strukturze GaN wyznaczone metodą fazy geometrycznej. Wartości ekstremalne są zlokalizowane w rdzeniach dyslokacji. Wszystkie składowe tensora dystorsji zostały wyznaczone w odniesieniu do niezdeformowanej sieci azotku galu. . . . .	50
4.1	Schemat rozważnych konfiguracji. . . . .	53
4.2	Wyznaczanie wektora Burgersa – metoda FS/RH. . . . .	59
4.3	Rdzenie dyslokacji B, C, D, G, I w strukturze CdTe/ZnTe/GaAs (oznaczenia wg. Rys. 3.1). . . . .	65
4.4	Rdzenie dyslokacji B, P, R w strukturze GaN (oznaczenia wg. Rys. 3.2). . . . .	66
4.5	Oslabienie stałych sztywności w celu uwzględnienia zmniejszonej możliwości przenoszenia naprężeń w obszarach rdzeni dyslokacji (struktura CdTe/ZnTe/GaAs). Pokazano zasięg takiego osłabienia dla dwóch dyslokacji oraz dla trzech wartości parametru $r$ . . . . .	68
4.6	Obraz rdzenia dyslokacji C z Rys. 3.2, wraz z wykresami naprężeń $\sigma_{xx}$ oraz parametrów $\hat{\alpha}$ i $e^{-r\hat{\alpha}}$ . . . . .	70
4.7	Schemat rozkładu naprężeń wokół dyslokacji niedopasowania. . . . .	72
4.8	Struktura CdTe/ZnTe/GaAs. Obszar, dla którego wyznaczono naprężenia oraz rozkład poszczególnych składników heterostruktury. . . . .	83
4.9	Struktura CdTe/ZnTe/GaAs. Parametr gęstości dyslokacji oraz składowa XX tensora naprężeń Cauchy'ego. . . . .	84
4.10	Naprężenia w heterostrukturze CdTe/ZnTe/GaAs. Składowe YY i XY tensora naprężeń Cauchy'ego. . . . .	85
4.11	Struktura GaN. Parametr gęstości dyslokacji oraz składowa XX tensora naprężeń Cauchy'ego. . . . .	87
4.12	Struktura GaN. Orientacja sieci kryształu oraz składowa XX tensora naprężeń Cauchy'ego. . . . .	88
4.13	Naprężenia w strukturze GaN. Składowe YY i XY tensora naprężeń Cauchy'ego. . . . .	89

# Spis tablic

2.1	Rozmiar sieci krystalicznych oraz stałe sztywności niektórych materiałów stosowanych w warstwach epitaksjalnych. . . . .	27
4.1	Wektory Burgersa $[nm]$ dyslokacji w strukturze CdTe/ZnTe/GaAs w odniesieniu do różnych konfiguracji czyli różnych sieci krystalicznych. Dane z pracy Kret i in. (2000) (oznaczenia dyslokacji wg. Rys. 3.1). . . . .	67
4.2	Stałe sztywności trzeciego rzędu [GPa] dla modelu Saint-Venanta – wykładnik $m = 2$ oraz dla modelu logarytmicznego – wykładnik $m = 0$ , zależność (4.94). . . . .	74