

Komitet Mechaniki Polskiej Akademii Nauk

Politechnika Rzeszowska  
im. Ignacego Łukasiewicza

Instytut Podstawowych Problemów Techniki  
Polskiej Akademii Nauk

III KRAJOWA KONFERENCJA

# NANO- i MIKROMECHANIKI



ORGANIZATORZY:



KKNM 2012

ISBN 978-83-89687-739

IPPT PAN, WARSZAWA 2012

Komitet Mechaniki Polskiej Akademii Nauk  
Instytut Podstawowych Problemów Techniki  
Polskiej Akademii Nauk  
Politechnika Rzeszowska  
im. Ignacego Łukasiewicza

## **III National Conference of Nano and Micromechanics**

Under the auspices of the Ministry of Science and Higher Education  
Prof. Barbara Kudrycka

## **III Krajowa Konferencja Nano i Mikromechaniki**

Pod patronatem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego  
Prof. Barbary Kudryckiej

4–6 July 2012

**IPPT PAN, Warszawa**

Toby D. Young, Grzegorz Jurczak, Paweł Dłużewski

## **Wpływ Defektów Struktury Krystalicznej na Elektromechaniczne Własności Nanostruktur**

### **Influence of Crystal Defects on Electromechanical Properties of a Nanostructures**

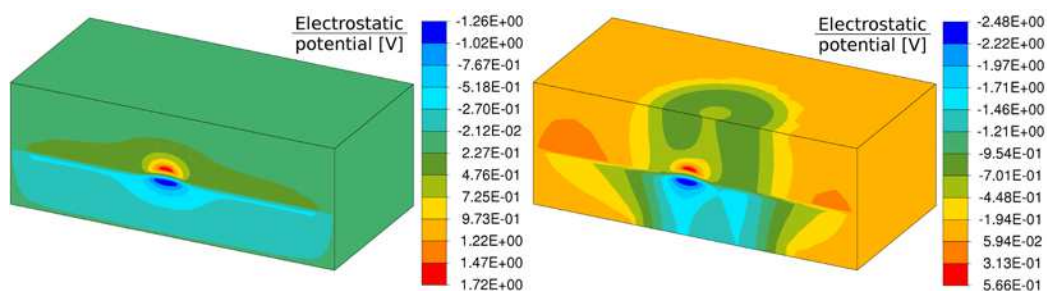
Zakład Metod Komputerowych, IPPT PAN, Warszawa, ul. Pawińskiego 5b

e-mail: [gjurcz@ippt.gov.pl](mailto:gjurcz@ippt.gov.pl)

**Słowa kluczowe: Piezoelektryczność, Mechanika Ośrodków Ciągłych, Metoda Elementów Skończonych, Nanostruktura**

Epitaksjalne struktury azotkowe (GaN, AlN, InN) zawierają ogromną liczbę defektów struktury krystalicznej, wśród których na szczególną uwagę zasługują tzw. threading dislocations, czyli dyslokacje przebijające na wskroś warstwy półprzewodnikowe [1]. Obserwacje eksperymentalne potwierdzają ścisły związek pomiędzy wzajemnym położeniem dyslokacji i położeniem nanostruktur kwantowych. Dodatkowa płaszczyzna krystalograficzna wyznaczająca dyslokację krawędziową wprowadza do struktury krystalicznej źródłowe pole dystorsji tworząc tym samym geometrycznie preferowane miejsce zarodkowania nanostruktury kwantowej [2]. W dalszej kolejności zakotwiczona na krawędzi kropki kwantowej dyslokacja wpływa na odkształcenia sprężyste istniejące w kropce, a zgromadzony wzdłuż linii dyslokacyjnej ładunek ma wpływ na własności elektryczne nanostruktury. Obecny w kryształach o strukturze wurcytu efekt polaryzacji spontanicznej powoduje w heterostrukturach silną tendencję do lokalizacji potencjału elektrostatycznego na kierunku równoległym do osi  $c$  kryształu [3]. Efekt ten, dominujący w strukturach hodowanych na kierunkach polarnych (wzrost zgodny z kierunkiem osi  $c$ ), wraz z efektem piezoelektrycznym determinują własności elektryczne i optoelektroniczne izolowanych kropek kwantowych [4]. Obecność w bliskim otoczeniu nanostruktury dyslokacji, wraz z jej polem przemieszczeń i ujemnym ładunkiem elektrycznym (niedomieszkowany GaN) o zasięgu dziesiątek nanometrów [5,6], prowadzi do poważnych zmian własności fizycznych kropek kwantowej. Wartość i rozkład potencjału elektrostatycznego wokół dyslokacji może być zmierzony za pomocą holografii mikroskopowej. Dla dyslokacji śrubowej jego wartość znacznie przekracza  $-1V$ , a rozkład przypomina rozkład normalny. Uwzględniając obecność naładowanej elektrycznie dys-

lokacji wyznaczamy jej wpływ na wartość i rozkład pól mechanicznych i elektrycznych w kropce kwantowej. Pomimo obszernych badań w tej dziedzinie, ilościowa ocena wpływu dyslokacji na własności mechaniczne, elektryczne i kwantowe (w tym optoelektryczne) nanostruktur jest ciągle sprawą otwartą. W celu określenia wpływu defektów struktury na własności fizyczne nanostruktur zbadano za pomocą metody elementów skończonych model heksagonalnej kropki kwantowej GaN/AlN wyhodowanej w okolicy dyslokacji krawędziowej. Zagadnienie brzegowe rozwiązano metodą elementów skończonych uwzględniając wzajemne oddziaływanie mechaniczno-elektryczne dla niejednorodnego chemicznie materiału piezoelektrycznego. Wyniki wskazują jakościowe i ilościowe różnice w stosunku do izolowanej nanostruktury bez dyslokacji.



Rys. 1 Rozkład potencjału elektrostatycznego w izolowanej, nanometrowej kropce kwantowej GaN/AlN oraz w kropce kwantowej wyhodowanej przy dyslokacji przebiegającej o składowej śrubowej.

Zgodnie z otrzymanymi wynikami dyslokacja przebiegająca o składowej śrubowej ma największy degradujący wpływ na własności elektryczne kropki kwantowej przy zanedbywalnie małym wpływie na własności mechaniczne kropki. Wynika to z względnie wysokiej wartości indukowanego potencjału elektrostatycznego, Rys.1. Specyfika rozkładu potencjału generowanego przez ładunki elektryczne zlokalizowane wzdłuż linii dyslokacji powodują, że potencjał elektrostatyczny kropki w porównaniu do niezdefektowanej struktury jest przesunięty w kierunku ujemnych wartości o stałą zależną od odległości od rdzenia dyslokacji. Z kolei, dyslokacja przebiegająca o składowej krawędziowej, ze względu na małą gęstość ładunku elektrycznego wzdłuż linii dyslokacji, ma umiarkowany wpływ na własności elektryczne kropki przy znacznym wpływie na własności mechaniczne kropki. Dyslokacja o składowej mieszanej, ze względu na swój charakter, znacząco modyfikuje zarówno pola mechaniczne jak i elektryczne obecne w kropkach.

#### LITERATURA:

- [1] P. DŁUŻEWSKI ET AL., INT. J. MULTISCALE COMP. ENG. **8**(3), 331-342. (2010).
- [2] J. L. ROUVIERE ET AL., APPL. PHYS. LETT. **75**, 2632. (1999).

- [3] A. D. ANDREEV ET AL., PHYS. REV. B. **62**, 15851. (2000).
- [4] T. D. YOUNG ET AL., PHYS. STAT. SOLIDI (C). **6, S2**, 557. (2009).
- [5] J. CAI ET AL., PHYS. STAT. SOL. (A) **192**, No. 2, 407–411. (2002).
- [6] P. DŁUŻEWSKI ET AL., COMPUT. MATER. SCI. **29**, 379. (2004).