

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Апрель **2014**, том **56**, выпуск **4**

<http://www.ioffe.ru/journals/ftt/>



С.-Петербург
НАУКА

УЧРЕДИТЕЛИ:
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. А. Ф. ИОФФЕ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

Журнал «Физика твердого тела»
Основан в январе 1959 г.

Выходит 12 выпусков в год

Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН

Главный редактор А. А. Каплянский

Редакционная коллегия:

В. С. Багаев, В. Л. Гуревич, В. В. Еременко,
Е. Л. Ивченко (зам. главного редактора), Ю. М. Каган,
М. В. Ковальчук, А. В. Кудинов, Ю. Г. Кусраев, А. Ч. Луцки,
Б. З. Малкин, А. И. Морозов, С. П. Никаноров, Б. В. Новиков,
В. В. Осико, Р. В. Писарев, Е. Г. Понятовский,
Б. И. Смирнов, В. Б. Тимофеев

Перевод журнала на английский язык осуществляет
Международная академическая издательская компания
«Наука/Интерпериодика»

Английская версия журнала выходит в свет одновременно с русской

Санкт-Петербург
Издательство «Наука»

© Российская академия наук, 2014 г.
© Редколлегия журнала
«Физика твердого тела» (составитель), 2014 г.

07,03

Зависимость критического радиуса частичных дислокационных петель от энергии дефекта упаковки в полупроводниках

© Ю.Ю. Логинов¹, А.В. Мозжерин², А.В. Брильков²

¹ Сибирский государственный аэрокосмический университет им. акад. М.Ф. Решетнева, Красноярск, Россия

² Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия

E-mail: loginov@sibsau.ru

(Поступила в Редакцию 15 июля 2013 г.)

Методом просвечивающей электронной микроскопии исследовано распределение дислокационных петель по размерам в полупроводниках CdTe, ZnTe, ZnSe, ZnS, CdS, GaAs, Si и Ge. Экспериментальные результаты сравниваются с теоретическими расчетами критических радиусов перехода частичных дислокационных петель в полные с учетом энергии образования дислокационных петель и энергии дефекта упаковки материалов. Показано, что критический радиус зависит от энергии дефекта упаковки и является важной характеристикой при анализе процессов дефектообразования в полупроводниках.

1. Введение

Полупроводниковые материалы широко используются в микроэлектронике и солнечной энергетике. При облучении или термообработках в полупроводниках, как правило, образуется большое количество дислокационных петель, размеры которых весьма различны. При достижении определенного значения радиуса дислокационной петли, который носит название критического (r_{crit}), происходят резкие изменения в плотности дислокационных петель с радиусами, большими r_{crit} . Резкий переход в плотности петель при увеличении их радиуса $r > r_{crit}$ авторы [1] связывают с переходом частичных дислокаций в полные. Критический радиус дислокационной петли можно рассматривать как важную характеристику, которая показывает те точки, после которых происходят качественные и количественные изменения дефектной сети материала. Поскольку энергия образования дислокационных петель связана с энергией дефекта упаковки (ЭДУ) материала, параметр ЭДУ является важным при анализе процессов дефектообразования и „дефектостойкости“. Известно, что с уменьшением ЭДУ происходит увеличение структурных нарушений в металлах [2,3]. Увеличение концентрации легирующей примеси в кремнии сопровождается снижением энергии дефекта упаковки, что связано с повышением интенсивности формирования примесных выделений [4]. При исследовании полупроводников A_2B_6 установлено, что интенсивность образования структурных дефектов при облучении электронами уменьшается в последовательности ZnS \rightarrow ZnSe \approx CdS \rightarrow CdTe \approx HgTe \rightarrow ZnTe и далее к GaAs \approx Si, что коррелирует с ростом значения ЭДУ этих материалов [5].

Целью настоящей работы является изучение методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) зависимости критического радиуса дислокационных пе-

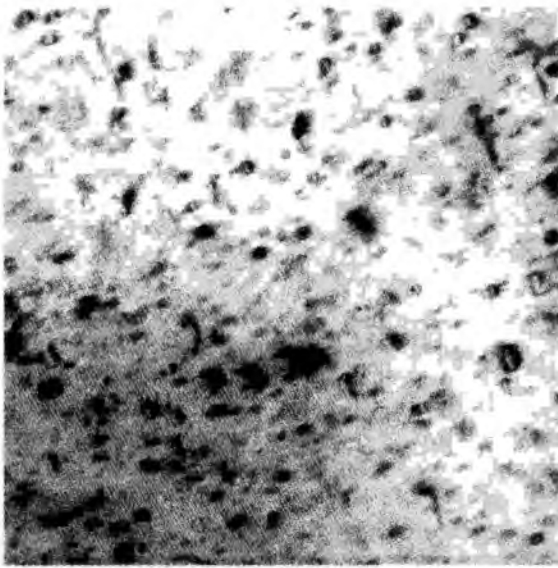
тель от энергии дефекта упаковки в полупроводниках CdTe, ZnTe, ZnSe, ZnS, CdS, GaAs, Si и Ge.

2. Экспериментальная часть

Методом ПЭМ исследовались монокристаллы полупроводников CdTe, ZnTe, ZnSe, ZnS, CdS, GaAs, Si и Ge, содержащие дислокационные петли, образовавшиеся в результате различных термообработок и (или) облучения электронами и ионами при условиях, подробно описанных в [5]. Монокристаллы полупроводников A_2B_6 были выращены из газовой фазы в запаянной трубке, а GaAs, Si и Ge были выращены методом Чохральского. Электронно-микроскопические исследования проводились на приборах JEM-100 CX, JEM-4000 EX II и JEM-2100. Образцы для исследования методом ПЭМ приготавливали стандартным методом, сначала механически утончая с использованием устройства Gatan Dimple Grinder, а затем — ионным травлением на установке Precision Ion Polishing System (PIPS), Gatan. Радиус r_{crit} определялся по методу, предложенному в [1], из гистограмм распределения дислокационных петель по размерам.

3. Результаты и обсуждение

На рис. 1 показаны характерные дислокационные петли, образовавшиеся в CdTe в результате ионного травления тонкой фольги ионами Ag^+ с энергией 5 keV в течение 15 min. Размеры петель находятся в интервале от 15 до 65 nm при плотности $2.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Распределение дислокационных петель по размерам показано на рис. 2. Критический радиус в данном случае можно оценить в соответствии с [1] как $48 \pm 3 \text{ nm}$. В этой области на рисунке наблюдается резкий скачок в плотности петель (показан стрелкой).



— 100 nm

Рис. 1. Образование дислокационных петель в CdTe в результате ионного травления тонкой фольги ионами Ag^+ с энергией 5 keV в течение 15 min. Светлопольное ПЭМ-изображение в рефлексе 220.

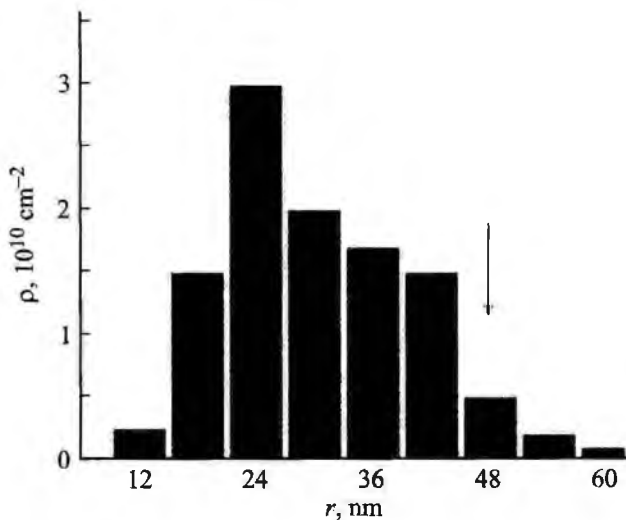


Рис. 2. Зависимость плотности ρ дислокационных петель от их размера r .

Известно, что процесс образования полной дислокационной петли с вектором Бюргерса $\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$ в ГЦК-кристаллах можно представить как результат взаимодействия частичных дислокаций Шокли и Франка с векторами Бюргерса $\frac{a}{2}\langle 112 \rangle$ и $\frac{a}{3}\langle 111 \rangle$. Например,

$$\frac{a}{6} [2\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6} [\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{3} [111] \rightarrow \frac{a}{2} [110]. \quad (1)$$

Согласно классической модели описания энергий процесса образования дислокационных петель, общая энергия образования дислокационной петли ($E_{l,perfect}$) включает в себя энергию дефекта упаковки дислокационной

петли (E_{SF}) и упругую энергию дислокационной линии ($E_{l, Frank}$) [6]:

$$E_{l,perfect} = E_{SF} + E_{l, Frank}, \quad (2)$$

где

$$E_{SF} = \pi r^2 \gamma, \quad (3)$$

$$E_{l, Frank} = 2\pi r \frac{\mu b_{Frank}^2}{4\pi(1-\nu)} \left[\ln \left(\frac{8\alpha r}{b_{Frank}} \right) - 1 \right], \quad (4)$$

$$E_{l,perfect} = 2\pi r \frac{\mu b_{Frank}^2}{4\pi(1-\nu)} \left[\ln \left(\frac{8\alpha r}{b_{Frank}} \right) - 1 \right] + 2\pi r \frac{2-\nu}{2(1-\nu)} \frac{\mu b_{in}^2}{4\pi} \left[\ln \left(\frac{8\alpha r}{b_{Shockley}} \right) - 2 \right], \quad (5)$$

r — радиус дислокационной петли, μ — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, α — фактор ядра дислокации, b_{Frank} — модуль вектора Бюргерса дислокационной петли Франка, $b_{Shockley}$ — модуль вектора Бюргерса дислокационной петли Шокли. В стандартном случае получается $b_{Frank} = \frac{a}{\sqrt{3}}$ и $b_{Shockley} = \frac{a}{\sqrt{6}}$. Здесь a — параметр решетки.

Таким образом, из (2)–(5) получаем связь между критическим радиусом r_{crit} и энергией дефекта упаковки γ

$$\gamma = \frac{\mu a^2}{24\pi r_{crit}} \frac{2+\nu}{(1-\nu)} \left[\ln \left(\sqrt{\frac{\alpha r_{crit}}{a}} \right) \right]. \quad (6)$$

В работе [1] проведена оценка ЭДУ в GaInNAs с помощью классической модели образования дислокационных петель и показано, что она не в полной мере описывает экспериментальные результаты. Более энергетически выгодным является процесс образования петель, учитывающий скольжение двух частичных дислокаций Шокли в разных плоскостях. В этом случае формула (2) приобретает вид [1]

$$E_{l,perfect} = E_{SF} + E_{l, Frank} + 2E_{Shockley}, \quad (7)$$

где

$$E_{shockley} = 2\pi r \frac{\mu b_{Shockley}^2}{4\pi} \left[\cos^2 \beta - \frac{\sin^2 \beta}{1-\nu} \right] \ln \left(\frac{\alpha r}{b_{Shockley}} \right), \quad (8)$$

где β — угол между вектором Бюргерса и дислокационной линией сегмента Шокли, равный $\pi/6$.

С учетом уравнений (7) и (8) выражение для γ можно записать как

$$\gamma = \frac{\mu a^2}{4800\pi r_{crit}(1-\nu)} \left[400\nu \ln \left(\frac{\alpha r_{crit}}{a} \right) + 32 + 343\nu \right]. \quad (9)$$

Зная значения ЭДУ для полупроводниковых материалов, с помощью уравнения (9) можно рассчитать критические радиусы дислокационных петель для различных полупроводников.

Для решения полученного трансцендентного уравнения использовался программный пакет „Maple“.

Значения r_{crit} для полупроводников

Материал	Параметр решетки, nm	Коэффициент Пуассона [7–9]	Модуль сдвига, GPa [7–9]	ЭДУ, mJ/m^2 [4–6,10]	r_{crit} , nm	
					Классическая модель	Классическая модель с учетом дислокаций Шокли
Ge	0.566	0.26	31.7	90	~ 25.1	~ 3.8
Si	0.543	0.27	42.9	50–60	46.5–58.1	7.9–10.1
GaAs	0.565	0.31	32.9	47 ± 5	47.8–62.1	9.5–12.6
ZnTe	0.609	0.36	17.3	16 ± 4	92.9–171	22.5–42.5
CdTe	0.648	0.41	9.2	11 ± 1.9	95.5–145	26.3–41
ZnSe	0.566	0.28	27.5	11.4 ± 1.3	197–257	38.4–51
CdS	0.527	0.4	16.1	7.8 ± 1.9	162–290	44.9–80.2
ZnS	0.541	0.38	21.7	5–6	405–500	110–136
		0.28	26.3			82–101

Значения r_{crit} для ряда полупроводников представлены в таблице.

Приведенные в таблице значения r_{crit} сравнивались с экспериментальными данными, полученными в результате электронно-микроскопических исследований полупроводниковых материалов. Установлено, что рассчитанные по классической модели значения r_{crit} не соответствуют экспериментальным и завышены на порядок величины. Значения r_{crit} , рассчитанные по формуле (9), находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными (последний столбец таблицы).

Из таблицы также видно, что критический радиус дислокационных петель в полупроводниках напрямую связан с энергией дефекта упаковки материала и уменьшается с ростом ЭДУ, т.е. чем выше ЭДУ в материале, тем меньше значение критического радиуса и тем более низка вероятность обнаружить крупные дислокационные петли. Это хорошо согласуется с электронно-микроскопическими исследованиями [5]. В частности, из экспериментов с использованием просвечивающего электронного микроскопа следует, что сульфид цинка, обладающий самой низкой величиной ЭДУ среди исследованных полупроводников, имеет самую высокую плотность и характеризуется разнообразием структурных дефектов, а размеры дислокационных петель могут достигать значений, на несколько порядков превышающих аналогичные размеры в других анализируемых материалах.

4. Заключение

Учитывая данные, полученные для всех исследованных материалов, можно считать, что ЭДУ — универсальная величина, указывающая на стойкость материала к дефектообразованию, что согласуется с ранее полученными результатами [2–5]. Значение критического радиуса дислокационной петли можно рассматривать как меру дефектостойкости полупроводников, при этом размеры и плотность структурных дефектов в материалах при

аналогичных условиях обработки зависят от величины энергии дефекта упаковки.

Список литературы

- [1] M. Herrera, D. Gonzalez, J.G. Lozano, R. Garcia, M. Hopkinson, H.Y. Liu, M. Gutierrez, P. Navaretti. *J. Appl. Phys.* **98**, 023 521 (2005).
- [2] С.Н. Вогинов, О.П. Максимкин. *Вопр. атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение 3(81)*, 23 (2002).
- [3] F. Ebrahimi, Z. Ahmed, H. Li. *Appl. Phys. Lett.* **85**, 3749 (2004).
- [4] Y. Ohno, T. Taishi, Y. Tokumoto, I. Yonenaga. *J. Appl. Phys.* **108**, 073 514 (2010).
- [5] Ю.Ю. Логинов, П. Браун, К. Дьюроуз. *Закономерности образования структурных дефектов в полупроводниках A_2B_6* . Логос, М. (2003). 304 с.
- [6] С. Амелинкс. *Методы прямого наблюдения дислокаций*. Мир, М. (1968). 440 с.
- [7] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/>
- [8] И.В. Горичок. *ФТТ* **54**, 1373 (2012).
- [9] <http://www.elektrosteklo.ru/Crystals.htm>
- [10] S. Takeuchi, K. Suzuki, K. Maeda, H. Iwanaga. *Phil. Mag. A* **50**, 171 (1984).

Содержание

• Сверхпроводимость

Деревянко В.В., Сухарева Т.В., Финкель В.А., Шахов Ю.Н.

Влияние температуры и магнитного поля на процессы эволюции вихревой структуры гранулярного высокотемпературного сверхпроводника $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ 625

Блинова Ю.В., Кузнецов М.В., Галахов В.Р., Сударева С.В., Криницина Т.П., Кузнецова Е.И., Дегтярев М.В., Снигирев О.В., Порохов Н.В.

Рентгеновские фотоэлектронные спектры и состав пленок $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, полученных методом лазерной абляции . . . 634

• Полупроводники

Кузанын А.С., Пашаян С.Т., Кузанын В.С., Татоян В.Т.

Влияние условий спекания и лазерного излучения на микроструктуру поверхности, химический состав и электропроводность керамики CuO/Ag 641

Перекрестов Б.И., Токий В.В., Токий Н.В., Волкова Г.К.

Влияние примеси лантанидов на анионную проводимость кубического диоксида циркония 647

• Диэлектрики

Сорокин Н.И.

Na^+ -ионная проводимость двойного фосфата $Na_3Sc_2(PO_4)_3$ в области β - γ -перехода 652

Шаблаев С.И., Грачев А.И.

Эффект светоиндуцированного падения сопротивления в объемных кристаллах $SrTiO_3$ 655

• Магнетизм

Полякова К.П., Поляков В.В., Юркин Г.Ю., Патрин Г.С.

Магнитные свойства поликристаллических пленок мультиферроиков $CoCr_2O_4$ и $CoFe_{0.5}Cr_{1.5}O_4$ 664

Покатилов В.С., Коновалова А.О., Покатилов В.В.

Особенности локальных структурных, валентных и магнитных состояний ионов железа в перовските $Bi_{0.5}Ca_{0.5}FeO_3$ 667

Карпинский Д.В., Троянчук И.О., Мантыцкая О.С., Чобот Г.М., Сиколенко В.В., Ефимов В., Точаг М.

Магнитные и пьезоэлектрические свойства системы $Bi_{1-x}La_xFeO_3$ вблизи перехода из полярной в антиполярную фазу 673

Мейлихов Е.З., Фарзетдинова Р.М.

Теория эффективного поля для разупорядоченных магнитных сплавов 679

• Сегнетоэлектричество

Сергеева О.Н., Богомолов А.А., Киселев Д.А., Малинкович М.Д., Пронин И.П., Каптелов Е.Ю., Сенкевич С.В., Пронин В.П.

Пирозлектрические и пьезоэлектрические свойства тонких пленок PZT на морфотропной фазовой границе 687

• Механические свойства, физика прочности и пластичность

Логинов Ю.Ю., Можерин А.В., Брильков А.В.

Зависимость критического радиуса частичных дислокационных петель от энергии дефекта упаковки в полупроводниках 692

Гуткин М.Ю., Колесникова А.Л., Красницкий С.А., Романов А.Е.

Петли дислокаций несоответствия в композитных наночастицах типа ядро-оболочка 695

Гуткин М.Ю., Смирнов А.М.

Зарождение прямоугольных призматических дислокационных петель в оболочках и ядрах композитных наночастиц 703

Биланич В.С., Бучук Р.Ю., Петраченков А.Е., Скубенич К.В., Студеняк И.П.

Внутреннее трение в суперионных кристаллах Cu_6PS_5Br и композитах на их основе 711

• Оптические свойства

Долганов П.В., Масалов В.М., Сухинина Н.С., Долганов В.К., Емельченко Г.А.

Инвертированный опал на основе полимерного наполнителя и трансформация его оптических характеристик 717

Омельченко К.С., Хмеленко О.В., Панченко Т.В., Волнянский М.Д.

Фотолуминесценция кристаллов $LiNaGe_4O_8$, активированных марганцем 722

Мельникова С.В., Исаенко Л.И., Голошумова А.А., Лобанов С.И.

Исследование сегнетоэластического фазового перехода в пирозлектрике $SrMgF_4$ 727

• Динамика решетки

Гашимзаде Ф.М., Гусейнова Д.А., Джахангири З.А., Мехтиев Б.Г., Оруджев Г.С.

Влияние давления на фононные спектры и упругие свойства орторомбического $GeSe$ 731

● **Фазовые переходы**

Меҳдиева Р.З., Лукин Е.В., Кичанов С.Е., Козленко Д.П., Джабаров С.Г., Данг Т.Н., Маммадов А.И., Савенко Б.Н.

Исследование структурных аспектов фазового перехода антисегнетоэлектрик – параэлектрик в двойном перовските Pb_2MgWO_6 при высоких давлениях и температурах 735

Василевская Т.Н.

Эволюция неоднородной структуры модельных натриево-силикатных стекол в процессе бинадального распада: исследование методом рентгеновского малоуглового рассеяния 741

Разумов И.К.

Аномальные дисперсные состояния сплавов, обусловленные сегрегацией примеси на межфазных границах 749

Михейкин А.С., Чернышов Д.Ю., Буш А.А., Прохоров А.С., Юзюк Ю.И., Дмитриев В.П.

Особенности ян-геллеровского перехода в твердых растворах $Ni_{1-x}Co_xCr_2O_4$ 754

Кукушкин С.А., Осипов А.В.

Фазовый переход первого рода через промежуточное состояние 761

● **Системы низкой размерности**

Шевцов С.В., Адиятуллин А.Ф., Свиридов Д.Е., Козловский В.И., Кузнецов П.И., Николаев С.Н., Кривобок В.С.

Фотоиндуцированное перераспределение заряда и его влияние на экситонные состояния в гетероструктурах $Zn(Cd)Se/ZnMgSSe/GaAs$ с квантовыми ямами 769

Варнаков С.Н., Гомоюнова М.В., Гребенюк Г.С., Заблуда В.Н., Овчинников С.Г., Пронин И.И.

Твердофазный синтез силицидов марганца на поверхности $Si(100)2 \times 1$ 779

● **Физика поверхности, тонкие пленки**

Вартанян Т.А., Гладских И.А., Леонов Н.Б., Пржибельский С.Г.

Тонкие структуры и переключение электропроводности в лабиринтных пленках серебра на сапфире 783

Миненков А.А., Богатыренко С.И., Сухов Р.В., Крышталь А.П.

Размерная зависимость энергии активации диффузии в слоистой пленочной системе $Cu-Ni$ 790

Кухто А.В., Почтенный А.Е., Мисевич А.В., Кухто И.Н., Семенова Е.М., Воробьева С.А., Sarantou E.

Оптические и электрофизические свойства нанокомпозитов на основе PEDOT : PSS и наночастиц золота/серебра . . . 794

● **Фуллерены**

Болотов В.В., Корусенко П.М., Несов С.Н., Поворознюк С.Н.

Влияние импульсного ионного облучения на электронную структуру многостенных углеродных нанотрубок 802

Мусатов А.Л., Израэльянц К.Р., Чиркова Е.Г.

Влияние атомов цезия на автоэлектронную эмиссию из многостенных углеродных нанотрубок 806

Одина Н.И., Коробов А.И.

Экспериментальное исследование параметра Грюнайзена монокристалла фуллерита C_{60} в области фазовых переходов при 90 и 260 К фотоакустическим методом 811

● **Графены**

Давыдов С.Ю.

О скорости Ферми и статической проводимости эпитаксиального графена 816

Алисултанов З.З., Камилов И.К.

Транспортные свойства эпитаксиального графена, сформированного на поверхности металла 821