

# ФІЗИКА. МЕТОДИКА ВИКЛАДАННЯ ФІЗИКИ І АСТРОНОМІЇ В ЗОШ ТА ВНЗ

УДК 539.4

Надточий В.А., Уколов А.И., Баранюкова И.С.

<sup>1</sup> доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики, ГВУЗ «ДГПУ»

<sup>2</sup> кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры высшей математики и физики, Керченский государственный морской технологический университет

<sup>3</sup> студентка 5 курса физико-математического факультета, ГВУЗ «ДГПУ»

e-mail: fiziksgpu@ya.ru

## УСТОЙЧИВОСТЬ ДИСЛОКАЦИЙ, СОЗДАННЫХ АКТИВНЫМ ИСТОЧНИКОМ В ТОНКОМ ПРИПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ КРИСТАЛЛА ПОЛУПРОВОДНИКА

Рассмотрена модель, в которой источник дислокаций заблокирован испущенными от него дислокациями в приповерхностном слое и они находятся под действием дислокационных сил изображения. Вычислены напряжения, действующие на дислокационный источник со стороны испущенной петли, полупетли и от дислокаций, являющихся их изображением. Показано, что при заданном внешнем напряжении силы изображения способны вывести на поверхность лишь малые дислокационные петли из глубины, не большей нескольких сотен ангстрем.

**Ключевые слова:** дислокация, полупроводник, силы изображения, эллиптический интеграл, диффузия, структура.

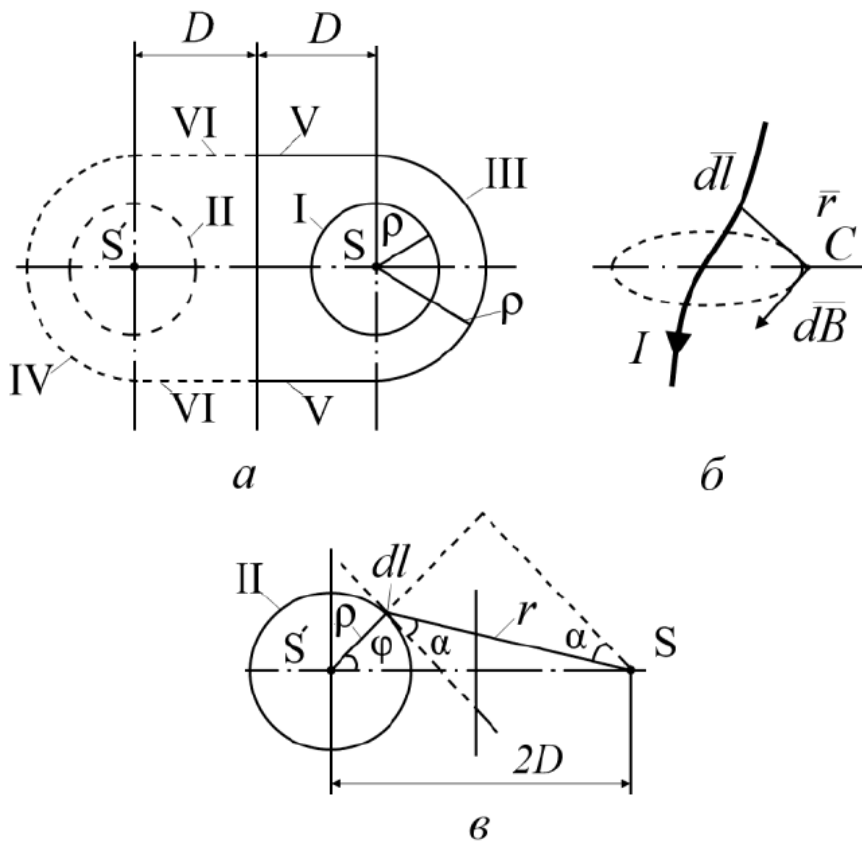
### Введение

Ковалентные кристаллы германий и кремний абсолютно хрупкие при температуре ниже 0,35 температуры плавления. Вместе с тем прецизионные измерения, выполненные с использованием высокочувствительных датчиков деформации, электрические измерения структурно чувствительных характеристик, структурные исследования с помощью оптической и электронной микроскопии, а также рентгеновский микроанализ дали возможность обнаружить ряд аномальных деформационных эффектов, проявляющихся в тонких

---

© Надточий В.А., Уколов А.И., Баранюкова И.С., 2017

приповерхностных слоях полупроводников, толщиной в несколько микрометров [1, 2]. Среди них можно отметить явление диффузионного массопереноса, являющегося основой диффузионно-дислокационного механизма микропластичности. В работе [3] впервые предложен новый физический механизм формирования квантово-размерных структур на поверхности германия за счет дислокационно-поверхностной диффузии. Массивы таких низкоразмерных ( $\leq 50$  нм) образований могут быть использованы в квантовых компьютерах.



**Рис. 1:** *a* – дислокационный источник  $S$  находится под действием напряжений от собственных дислокаций и дислокации зеркального источника  $S'$ ; *б* – электромагнитная модель, в которой силовая характеристика  $d\bar{B}$  представляется родственной функции  $d\bar{l}$  в модели *a*; *в* – вспомогательное построение для расчета  $\tau_b^{II}$

Практическая реализация полупроводниковых наноструктур требует разработки способа создания высокой плотности дислокаций в тонком слое кристалла, а также исследования их устойчивости при действии сил зеркального изображения, стремящихся вытянуть их на поверхность. В данной работе для этого воспользовались уравнениями [4], где в рамках линейной теории упругости изотропной среды определено поле напряжений дислокации, перпендикулярной в месте выхода к свободной поверхности (рис. 1). Способ создания такого вида петель рассмотрен в работах [1, 3].

## Основная часть

Представляет интерес провести сравнительную оценку эффективных напряжений, необходимых для работы приповерхностных и объемных дислокационных источников одинаковой геометрии и природы, а также сравнить соответствующие величины обратных напряжений, запирающих эти источники. Такая сравнительная оценка величин обратных и соответствующих эффективных напряжений, действующих на источник, испустивший одну круговую петлю или одну полупетлю вблизи свободной поверхности и в объеме кристалла (рис. 1), была нами сделана для *Ge*. При этом использовалась методика расчета, предложенная в [4].

Согласно Пичу и Келеру [5], сдвиговое напряжение  $\overline{d\tau}$  в том месте  $\overline{r}$ , где действуют напряжения от элемента дислокационной петли  $\overline{dl}$ , определяется как

$$\overline{d\tau} = \frac{Gb}{4\pi} \frac{[\overline{dl} \times \overline{r}]}{r^3}. \quad (1)$$

Это уравнение подобно выражению для вектора магнитной индукции  $d\overline{B}$  (силовой характеристики поля) в некоторой точке *C*, создаваемой витком с током величиной *J* (рис. 1):

$$d\overline{B} = \frac{\mu_0 \mu J}{4\pi} \frac{[\overline{dl} \times \overline{r}]}{r^3}. \quad (2)$$

Величины обратных напряжений, действующих от участков дислокаций I, II, III, IV, V и VI (рис. 1) на источник *S* внутри кристалла, можно рассчитать интегрированием уравнения (1). Тогда обратное напряжение петли I

$$\tau_b^I = \frac{Gb}{4\pi} \int_0^{2\pi\rho} \frac{\rho \sin(\widehat{dl, \rho})}{\rho^3} dl = \frac{Gb}{4\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\rho} = \frac{Gb}{2\rho}. \quad (3)$$

Здесь  $dl = \rho d\varphi$

$$\tau_b^{II} = -\frac{Gb}{4\pi} \int \frac{r \sin(\widehat{dl, r})}{r^3} dl.$$

Перейдем от переменного *r* к  $\rho$ :

$$r = \sqrt{\rho^2 + 4D^2 - 4D\rho \cos \varphi}.$$

Из рис. 1,  $r \sin(\widehat{dl, r}) = r \sin \alpha = 2D \cos \varphi - \rho$ ; тогда подстановка в  $\tau_b^{II}$  дает

$$\tau_b^{II} = -\frac{Gb}{4\pi} \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{\rho^2 - 2D\rho \cos \varphi}{(\rho^2 + 4D^2 - 4D\rho \cos \varphi)^{\frac{3}{2}}} \right\} d\varphi \quad (4)$$

Перейдем к новым параметрам и преобразуем выражение, стоящее в знаменателе:

$$\varphi = \pi - 2\beta; \cos \varphi = -\cos 2\beta; d\varphi = -2d\beta; \cos 2\beta = 1 - \sin^2 \beta.$$

При  $\varphi = 0$   $\beta = \pi/2$ ,  $\varphi = 2\pi$   $\beta = -\pi/2$ . Тогда после преобразований

$$\rho^2 + 4D^2 - 4D\rho \cos \varphi = (\rho + 2D)^2 [1 - K^2 \sin^2 \beta]. \quad (5)$$

Здесь

$$k^2 = \frac{8D\rho}{(\rho + 2D)^2}; \quad (6)$$

после преобразования имеем

$$\tau_b^{II} = -\frac{Gb}{4\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\rho^2 + 2D\rho - 4D\rho \sin^2 \beta}{\{(\rho + 2D)^2 [1 - k^2 \sin^2 \beta]\}^{\frac{3}{2}}} d\beta. \quad (7)$$

Интеграл (7) можно выразить как

$$\tau_b^{II} = \frac{Gb}{4\pi} \rho \frac{\partial J_1}{\partial \rho}, \text{ где } J_1 = \frac{4}{\rho + 2D} \int_0^{\pi/2} \frac{d\beta}{[1 - k^2 \sin^2 \beta]^{\frac{1}{2}}}. \quad (8)$$

Проверим, выполняется ли это соотношение

$$J_1 = \frac{4}{\rho + 2D} \int_0^{\pi/2} \frac{d\beta}{[1 - k^2 \sin^2 \beta]^{\frac{1}{2}}} = 4 \int_0^{\pi/2} \frac{d\beta}{[(\rho + 2D)^2 - 8D\rho \sin^2 \beta]^{\frac{1}{2}}},$$

$$\frac{dJ_1}{d\rho} = -\frac{1}{\rho} \int_0^{\pi/2} \frac{\rho^2 + 2D\rho - 4D\rho \sin^2 \beta}{[(\rho + 2D)^2 \cdot (1 - k^2 \sin^2 \beta)]^{\frac{3}{2}}} d\beta. \quad (9)$$

Сравнивая правые подынтегральные части уравнений (7) и (9), находим, что они полностью идентичны, откуда следует, что действительно

$$\tau_b^{II} = -\frac{Gb}{4\pi} \rho \frac{\partial J_1}{\partial \rho}.$$

Решим интеграл

$$J_1 = \frac{4}{\rho + 2D} \int_0^{\pi/2} (1 - k^2 \sin^2 \beta)^{-\frac{1}{2}} d\beta = \frac{4}{\rho + 2D} F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)$$

Здесь  $F\left(\frac{\pi}{2}, k\right)$  – полный эллиптический интеграл I рода [6],

$$F\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = \frac{\pi}{2} \left[ 1 + 2\frac{k^2}{8} + 9\left(\frac{k^2}{8}\right)^2 + \dots \right],$$

$$J_1 = \frac{4\pi}{2(\rho + 2D)} \left[ 1 + 2\frac{k^2}{8} + 9\left(\frac{k^2}{8}\right)^2 + \dots \right]$$

После подстановки значения  $k^2$  (см. [6]), преобразований и дифференцирования получим

$$\frac{\partial J_1}{\partial \rho} = -\frac{\pi\rho}{8D^3}; \quad \tau_b^{II} = \frac{Gb}{4\pi} \rho \frac{\partial J_1}{\partial \rho} = -\frac{Gb\rho^2}{32D^3}. \quad (10)$$

Напряжение  $\tau_b^{III}$  определяется аналогично  $\tau_b^I$ :

$$\tau_b^{III} = \frac{Gb}{4\pi} \int_0^\pi \frac{1}{\rho} d\varphi = \frac{Gb}{4\rho}. \quad (11)$$

Выражение для  $\tau_b^{IV}$  находится аналогично  $\tau_b^{II}$  путем перехода к эллиптическому интегралу II рода:

$$\tau_b^{IV} = -\frac{Gb}{4\pi} \int_{\pi/2}^{3\pi/2} \frac{\rho^2 - 2D\rho \cos \varphi}{(\rho^2 + 4D^2 - 4D\rho \cos \varphi)^{\frac{3}{2}}} d\varphi = \frac{Gb}{4\pi} \rho \frac{\partial J_2}{\partial \rho}, \quad (12)$$

где  $J_2 = \frac{4}{\rho+2D} \int_0^{\pi/4} (1 - k^2 \sin^2 \beta)^{-\frac{1}{2}} d\beta$ ;  $k^2 = \frac{8D\rho}{(\rho + 2D)^2}$ .

Правая подынтегральная часть выражения  $J_2$  представляет эллиптический интеграл  $F = (\pi/4, k)$ , который находится так же, как это было сделано ранее для  $\tau_b^{II}$ . После подстановки значения  $K$ , преобразований и дифференцирования получим

$$\tau_b^{IV} = -\frac{Gb}{4\pi} \left[ \frac{\pi\rho}{(\rho + 2D)^2} - \frac{0,4(2D\rho)^{\frac{1}{2}}}{(\rho + 2D)^2} + \frac{1,6(2D\rho)^{\frac{1}{2}}\rho}{(\rho + 2D)^3} \right]. \quad (13)$$

Путем несложных тригонометрических преобразований находятся  $\tau_b^V$  и  $\tau_b^{VI}$

$$\begin{aligned} \tau_b^{VI} &= -2 \frac{Gb}{4\pi} \int_{\arctg(\frac{D}{\rho})}^{\arctg(\frac{2D}{\rho})} \frac{\cos \varphi}{\rho} d\varphi = \\ &= -\frac{Gb}{2\pi\rho} \left\{ \sin \left[ \arctg \left( \frac{2D}{\rho} \right) \right] - \sin \left[ \arctg \left( \frac{D}{\rho} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\tau_b^V = 2 \frac{Gb}{4\pi} \int_0^{\arctg(\frac{D}{\rho})} \frac{\cos \varphi}{\rho} d\varphi = \frac{Gb}{2\pi\rho} \sin \left[ \arctg \left( \frac{2D}{\rho} \right) \right]. \quad (15)$$

В выражениях для  $\tau_b^V$  и  $\tau_b^{VI}$  учтено действие одновременно двух участков петель V и VI (рис. 1).

Рассмотрим теперь работу двух дислокационных источников: одного в объеме и другого вблизи поверхности кристалла, которые генерируют дислокационные петли. Предположим, что на начальной стадии работы источников каждый из них излучил по одной петле. Тогда обратное запирающее напряжение, действующее на источник в объеме кристалла будет равно  $\tau_b^I$ , а на источник вблизи поверхности —  $\tau_G = \tau_b^I - \tau_b^{II} = \frac{Gb}{2\rho} - \frac{Gb\rho^2}{32D^3}$ , т.е. меньше на величину  $\tau_b^{II}$ . Таким образом, компонент изображения представляет собой напряжение, на величину которого понижается обратное напряжение  $\tau_G$ , запирающее источник, и, как следствие этого, повышается соответствующая величина эффективного напряжения генерирования петель приповерхностным источником дислокаций. При  $D \rightarrow \rho$   $\tau_b^{II} \rightarrow Gb/32\rho$ . Пусть  $\rho = 40 \text{ \AA}$ . Тогда для германия получим  $\tau_b^{II} = 15,6 \text{ кгс/мм}^2$ ). Компоненту  $\tau_b^{II}$  можно также рассматривать как напряжение, стремящееся вытянуть уже готовую петлю I на свободную поверхность. При аналогичных параметрах  $R = 40 \text{ \AA}$  и  $a = 40 \text{ \AA}$  по модели Бастечка [7] имеем  $\tau_G = 54,6 \text{ кгс/мм}^2$ ), т.е. величину несколько большую, чем  $\tau_b^{II}$ . Это является вполне естественным, поскольку в данном случае имеет место более выгодная ориентация петли относительно действия сил изображения (петля призматическая, параллельная поверхности).

При условии, если источник вблизи поверхности излучает петлю, которая выходит на поверхность, превращаясь в полупетлю, имеем

$$\begin{aligned} \tau_G = \tau_b^{III} + \tau_b^V + \tau_b^{VI} + \tau_b^{IV} = \frac{Gb}{4\rho} + \frac{Gb}{2\pi\rho} \sin \left[ \arctg \left( \frac{D}{\rho} \right) \right] - \\ - \frac{Gb}{2\pi\rho} \left\{ \sin \left[ \arctg \left( \frac{2D}{\rho} \right) \right] - \sin \left[ \arctg \left( \frac{D}{\rho} \right) \right] \right\} - \\ \frac{Gb}{4\pi} \left[ \frac{\pi\rho}{(\rho + 2D)^2} - \frac{0,4(2D\rho)^{\frac{1}{2}}}{(\rho + 2D)^2} + \frac{1,6(2D\rho)^{\frac{1}{2}}\rho}{(\rho + 2D)^3} \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

При  $D \rightarrow \rho$  после вычислений получим  $\tau_G = 0,3625 Gb/\rho - 0,0438 Gb/\rho$ . В этом случае зеркальная компонента напряжения изображения выше, чем для круговой петли, и при тех же условиях ( $\rho = 40 \text{ \AA}$ ) для германия составит величину  $21,9 \text{ кгс/мм}^2$ ). Следовательно, величина эффективного напряжения на источнике будет еще больше, чем в первом случае.

Зная величины напряжений, при которых движутся дислокации в соответствующих материалах, можно найти глубину слоя  $a_{кр}$ , из которого петля будет выходить на поверхность.

Задаваясь для *Si* и *Ge* при  $T < T_{кр}$  ( $T_{кр}$  — температурный порог хрупкости) значением  $\tau \simeq 40 - 60 \text{ кгс/мм}^2$  для петель радиуса  $\rho = 40 \text{ \AA}$  находим  $a_{кр} \simeq 40 - 60 \text{ \AA}$ , и для  $R = 400 \text{ \AA}$   $a_{кр} \simeq 40 - 100 \text{ \AA}$ . Для нашего случая полупетель с  $R = 4 \text{ мкм} = 40000 \text{ \AA}$ , используемых для выращивания наноструктур [3]  $a_{кр} = 0,4 \text{ мкм} = 4000 \text{ \AA}$ . Таким образом можно полагать, что используемые нами для полупроводниковых нанотехнологий дислокационные петли с размерами, равными  $4 \div 5 \text{ мкм}$  не смогут выходить на поверхность под действием сил изображения  $a_{кр} < R$  будут устойчивыми.

## Выводы

Выполнена сравнительная оценка обратных напряжений, действующих на дислокационный источник вблизи поверхности кристалла со стороны испущенных дислокаций и дислокаций изображения. Установлено, что малые дислокационные петли ( $40 - 100 \text{ \AA}$ ) могут выходить на поверхность под действием дислокаций изображения из глубины. Чем больше размеры петли, тем больше толщина слоя, из которого они могут выходить на поверхность. Петли дислокаций, созданные в *Ge* и *Si* при  $T = 300 \text{ K}$  с размерами  $1 - 5 \text{ мкм}$  останутся стабильными.

## Литература

1. Надточий В.А. Микропластичность алмазоподобных кристаллов (*Si*, *Ge*, *GaAs*, *InAs*): дис. ... доктора физ.-мат. наук: 01.04.07 / Харьковский национальный университет. — Харьков, 2006. — 467 с.

2. *Nadtochiy V.* Investigation of dislocations in *Ge* single crystals by scanning electron beam / V. Nadtochiy, M. Golodenko, D. Moskal // *Functional Materials*. — 2004. — V11, №1 . — P. 40–43.
3. *Уколов А.И.* Образование дефектов и низкоразмерных атомных структур в приповерхностных слоях германия в процессе деформации в интервале температур 300–600 К: дисс. ... канд. физ.-мат. наук, 01.04.07 / Харьк. национ. ун-т. — Харьков, 2006. — 163 с.
4. *Sumino K.* Easy operation of dislocation sources in the surface region of crystal during plastic deformation / K. Sumino // *J. Phys. Soc. Japan*. — 1962. — Vol.17, №3. — P. 454–462.
5. *Peach M.* The forces exerted on dislocations and stress fields produced by them / M. Peach, J. S. Koehler // *Phys. Rev.* — 1950. — V.80, №3. — P. 436–439.
6. *Фихтенгольц Г.М.* Курс дифференциального и интегрального исчисления. — М.: Высшая школа. — 1948. — Т.2. — 320 с.
7. *Bastecka J.* Interaction of dislocation loop with free surface / J. Bastecka // *Czech. Journ. Phys (b)*. — 1964. — Vol.14, №6. — P. 431–442.

---

**Nadtochiy Viktor A., Ukolov Aleksey I., Baranyukova Irina S.**

Donbas State Teachers' Training University, Slovijans'k, Ukraine.

**Dislocation stability, created by an active source of a thin near-surface layer of a semiconductor crystal**

A model is considered in which a dislocation source is blocked by dislocations emitted from it in the near-surface layer and they are under the action of dislocation image forces. The stresses acting on the dislocation source from the side of the emitted loop, the half loop and from the dislocations that are their images are calculated.

It is shown that at a given external voltage, the image forces are able to bring to the surface only small dislocation loops from a depth not exceeding several hundred angstroms.

**Keywords:** *dislocation, semiconductor, image forces, elliptic integral, diffusion, structure.*