

01; 05

© 1990 г.

О ПОРОГЕ ПОДВИЖНОСТИ ДИСЛОКАЦИЙ В ПРИМЕСНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Б. В. Петухов

Предлагается кинетическая модель для описания наблюдаемого в примесных полупроводниках порогового поведения подвижности дислокаций. Модель основана на самосогласованном характере движения дислокаций в рельефе Пайерлса с увлечением примесей и связывает порог с потерей устойчивости стационарного режима движения дислокаций.

Введение

При изучении влияния примесей на подвижность дислокаций в полупроводниковых материалах было обнаружено пороговое поведение, заключающееся в том, что движение дислокаций имеет место, лишь когда приложенное напряжение превышает некоторую конечную величину (см., например, [1⁻⁸]). В качестве примера укажем, что типичные значения пороговых напряжений в кремнии с содержанием кислорода 10^{17} — 10^{18} см⁻³ составляют 1—10 мВ/м² [5]. Интерес к изучению этого явления подогревается, в частности, тем обстоятельством, что в области нагрузок ниже пороговых дислокации от поверхностных источников не проникают в объем материала [8], что используется при получении малодислокационных кристаллов полупроводников.

Суммируем основные черты экспериментальных наблюдений, важные для установления механизма явления.

1. При достижении порогового напряжения скорость дислокаций падает скачком от конечного значения ниже экспериментально измеримого предела.

2. Значения скорости дислокаций в окрестности порога по крайней мере на один-два порядка превышают характерные скорости, при которых образуется атмосфера Коттрелла.

3. Пороговые напряжения для страгивания дислокаций из положения покоя (стартовые напряжения), как правило, превышают напряжения остановки движущихся дислокаций.

4. Пороговые напряжения зависят от подвижности примесей и, как правило, убывают с ее уменьшением.

Считается установленным, что наличие порога подвижности обусловлено собиранием примесей дислокацией. Однако конкретный механизм закрепления дислокаций остается еще неясным и предлагаются различные модели (см., например, [7, 9, 10]). Механизмы, предложенные в работах [7, 9], качественно объясняют наличие стартовых напряжений существованием дополнительной тормозящей силы, создаваемой избытком примесей в ядре дислокации, но не связывают распределение центров закрепления с подвижностью дислокации и по этой причине не приспособлены для описания динамических экспериментов. Работа [10] описывает переход к затухающему движению дислокаций при наличии достаточно мощных препятствий, сила взаимодействия которых с дислокацией превышает амплитуду кристаллического рельефа и механизм движения является промежуточным между пайерлсовским и стопористическим. Между тем ярко выраженное пороговое поведение наблюдалось также и при большом разнообразии типов примесей, взаимодействие которых с дислокаци-

ями не столь сильно, и нет оснований считать механизм движения дислокаций отличным от действующего в чистых кристаллах. Например, примеси кислорода практически не влияют на скорость движения дислокаций в кремнии при больших напряжениях, но останавливают их при уменьшении напряжения ниже некоторого критического значения. Поэтому целью настоящей работы является развитие модели для описания порогового поведения подвижности дислокаций в рамках пайерлсовского механизма их движения.

Механизм порога

При описании процесса остановки дислокации в динамических экспериментах и с учетом зависимости порогового напряжения от подвижности примесей кажется естественным исходить не из силового критерия (существования некоторой избыточной силы закрепления), а из кинетического. Предлагаемый подход основан на самосогласованном характере движения дислокаций при увлечении примесей, при котором порог является следствием потери устойчивости стационарного режима движения.

Опишем общую качественную картину явления. Взаимодействие между дислокацией и примесями приводит к их увлечению движущейся дислокацией. При малой скорости движения вокруг дислокации успевает образоваться равновесная атмосфера с повышенной концентрацией примесей в ядре $c = c_p = c_0 \times$

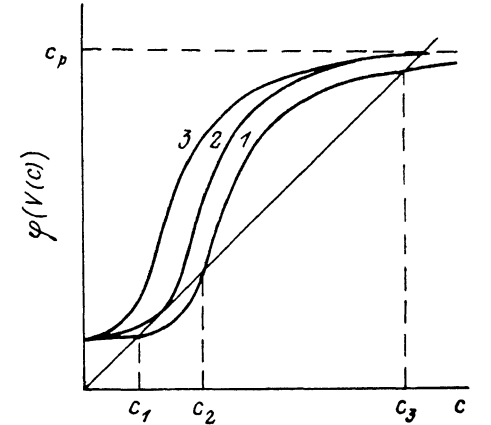


Рис. 1. Схема решения уравнения (1) при различных напряжениях, убывающих от кривой 1 к кривой 3.

При напряжении σ_0 , отвечающем кривой 2, касящейся биссектрисы, две ветви решений сливаются и при $\sigma < \sigma_0$ исчезают.

$\times \exp \{E_{св}/(kT)\}$, где c_0 — средняя концентрация примесей в кристалле, $E_{св}$ — энергия связи примеси с дислокацией. При большой скорости движения дислокации V примеси не успевают перераспределяться, так что концентрация примеси в окрестности дислокации является убывающей функцией скорости движения $c = \varphi(V)$. Находящиеся в окрестности дислокации примеси тормозят ее движение, так что скорость дислокации является в свою очередь убывающей функцией концентрации примесей $V = V(c)$. Таким образом, существует положительная обратная связь и увеличение концентрации примесей в ядре дислокации может превратиться в лавинообразный процесс. Напишем уравнение для самосогласованного определения стационарной концентрации примесей в ядре дислокации

$$c = \varphi(V(c)). \quad (1)$$

На рис. 1 схематически проиллюстрировано решение этого уравнения для различных значений напряжения. При достаточно больших напряжениях как видно из рисунка (кривая 1), существуют три решения, отвечающие различным стационарным режимам движения дислокации: с малой концентрацией примесей c_1 и большой скоростью движения $V(c_1)$, с большой концентрацией c_3 , приближающейся к равновесной, и соответственно малой скоростью $V(c_3)$ и промежуточное c_2 , являющееся неустойчивым. При малом напряжении (кривая 3) имеется лишь одно решение с почти равновесной концентрацией примесей и малой скоростью движения. Существует некоторое промежуточное критическое напряжение σ_0 , при котором исчезает ветвь стационарных решений, отвечающих относительно быстрому движению дислокаций (кривая 2). При уменьшении напряжения ниже σ_0 система переходит на новый стационарный режим за счет лавинообразного нарастания концентрации примесей в ядре дислокации до значений, приближающихся к равновесным. Подвижность дислокаций па-

дает при этом на несколько порядков. Этот срыв стационарного режима движения дислокации мы и будем считать ответственным за наблюдаемое в эксперименте пороговое поведение подвижности дислокаций, отождествляя σ_c с пороговым напряжением.

Предлагаемая модель позволяет объяснить наиболее существенные качественные черты изучаемого явления. В первую очередь скачкообразный характер перехода, совершающегося при конечной величине скорости дислокации (в отличие от плавного, при котором $V \rightarrow 0$ при $\sigma \rightarrow \sigma_c$). Кроме того, может быть объяснено различие пороговых напряжений при статических и динамических экспериментах. При разгоне дислокации из положения старта выход на стационарный режим осуществляется при различной начальной концентрации примесей на дислокации c_n , определяемой условиями выведения на старт и временем выдержки. Неустойчивое решение $c=c_2$ делит значения концентрации на две области, тяготеющие к тому или иному устойчивому стационарному решению, так что выход на интересующий нас режим движения с заметными скоростями, отвечающий $c=c_1$, происходит при $c_n < c_2$ (а при $c_n > c_2$ происходит уход в сторону режима $c=c_3$). Таким образом, условием, определяющим стартовое напряжение, является $c_2(\sigma_{cr})=c_n$. Нетрудно убедиться, что определяемая отсюда величина стартового напряжения совпадает с σ_c лишь при $c_n < c_2$ и превышает σ_c при $c_n > c_2$.

Описанная качественная схема порогового поведения подвижности дислокаций не зависит от конкретного механизма собирания дислокацией примесей, если только этот механизм удовлетворяет некоторым общим условиям. Примерами таких условий являются достаточная резкость функции $\varphi(V(c))$, зависимость скорости дислокации только от концентрации примесей, а не от кинетики ее изменения в процессе преодоления барьеров и т. п.

Увлечение примесей движущейся дислокацией

Для описания собирания примесей движущейся дислокацией предложено несколько моделей (см., например, [11-13]). Однако специфика изучаемого явления не позволяет воспользоваться результатами этих расчетов, в той или иной степени основанных на континуальном описании диффузии примесей. Согласно экспериментальным данным [2, 4] и др., критическая скорость по крайней мере на один-два порядка превышает величину характерной скорости образования протяженной примесной атмосферы, выражающейся по модели [11] через коэффициент диффузии примесей в кристалле. При движении дислокаций с такими относительно большими скоростями примеси можно считать мало подвижными, перемещающимися с заметной скоростью лишь под действием сильных полей напряжений дислокации в непосредственной окрестности ядра дислокации. Естественно описывать такое мелкомасштабное перемещение в рамках простой дискретной модели, оперируя неравновесной концентрацией примесей c на самой дислокации (т. е. в ее ядре).

Напишем уравнение баланса числа примесей на дислокации при ее переходе из одной долины рельефа Пайерлса в другую

$$\delta c = \frac{dc}{dt} \frac{a}{V} = \lambda_1 \cdot c_0 - c(t) \cdot p \exp\left[-\frac{a}{V\tau_1}\right]. \quad (2)$$

Здесь a — период рельефа, p — вероятность отрыва дислокации от примеси при переходе. Эта величина определяется спецификой взаимодействия кинка с примесью и не зависит от средней скорости движения всей дислокации. Если E_1 обозначает высоту барьера для преодоления кинком примеси [14], E_x — энергию поперечной миграции примеси в ядре дислокации, то $p \approx 1$ при $E_1 < E_x$ и $p \approx \exp[-((E_1 - E_x)/(kT))]$ при $E_1 > E_x$ (более детальная оценка p будет дана в отдельной работе). Далее, $1/\tau_1 \equiv (1/\tau) \exp[U/kT]$ — частота переходов оторвавшихся примесей на дислокацию, отличающаяся в силу принципа детального равновесия от частоты обратных переходов $1/\tau$ множителем $\exp[U/kT]$ (U — разность энергии примеси в ее положениях на дислокации и в оставленной долине рельефа). При движении дислокации с большой ско-

ростью время ее смещения на один период решетки a/V мало по сравнению со временем диффузионного скачка примеси $\tau = a^2/D_{\perp}$ (D_{\perp} — коэффициент поперечной диффузии, отличающийся вследствие вносимых ядром дислокации искажений решетки от коэффициента диффузии примеси в объеме кристалла). В то время как обратными переходами примесей за время a/V можно пренебречь, переходы на дислокацию, идущие с гораздо большей частотой $1/\tau_1$, успевают происходить, что и приводит к увлечению примесей дислокацией. В результате после истечения времени a/V до следующего скачка дислокации в очередную долину не воссоединившейся с дислокацией из общего числа оторвавшихся примесей cp остается только доля $\exp[-(a/V\tau_1)]$. Таким образом, получаем член ухода в кинетическом уравнении (2) в виде $cp \exp[-(a/V\tau_1)]$. Член прихода пропорционален концентрации примесей в объеме кристалла c_0 . Коэффициент пропорциональности λ_1 играет роль некоторого координационного числа. В интересующей нас области скоростей вблизи порога $\lambda_1 \sim 1$.

Решая уравнение (2) с учетом начального условия $c(0) = c_n$, находим

$$c(t) = \left(c_n - \lambda_1 \frac{c_0}{p} \exp\left[\frac{a}{V\tau_1}\right] \right) \exp\left\{-\frac{tV}{a} \exp\left[-\frac{a}{V\tau_1}\right]\right\} + \lambda_1 \frac{c_0}{p} \exp\left[\frac{a}{V\tau_1}\right]. \quad (3)$$

Как видно из (3), время выхода на установившийся режим составляет величину порядка $(a/V) \exp[a/V\tau_1]$. В установившемся режиме концентрация сорбанных на дислокации примесей составляет

$$c = \lambda_1 \frac{c_0}{p} \exp\left[\frac{a}{V\tau_1}\right]. \quad (4)$$

Этот результат был получен в пренебрежении обратными переходами примесей с дислокации в объем кристалла — процессом, приводящим к установлению равновесия. Поэтому выражение (4) справедливо, лишь пока $c \ll c_p = c_0 \exp \times [E_{cb}/kT]$, т. е. при не слишком малых скоростях движения дислокации.

Самосогласованный режим движения дислокаций

Находящиеся в ядре дислокации примеси играют роль препятствий для движения перегибов и при достаточно большой концентрации могут оказывать заметное обратное влияние на движение дислокаций. В этом случае концентрация примесей и скорость дислокации должны находиться самосогласованным образом.

Проиллюстрируем характер зависимости $V(c)$, используя известное выражение для скорости дислокации $V \simeq a \sqrt{Iv}$ (см., например, [15]). Здесь I — частота рождения пар перегибов в единицу времени на единице длины дислокации, v — скорость бокового движения перегибов. Влияние примесей на скорость перегибов опишем выражением

$$v = \frac{v_0}{1 + \lambda_2 p \cdot c \exp\left[\frac{E_1}{kT}\right]}. \quad (5)$$

Здесь v_0 — скорость перегиба в отсутствие примесей, λ_2 — малосущественный для дальнейшего предэкспоненциальный множитель. Формула (5) при $E_1 < E_m$ ($p=1$) была выведена в [14]. Обобщенное выражение записано с учетом того, что при $E_1 > E_m$ высота барьера для перегиба становится равной E_m . Подставляя (5) в выражение для скорости дислокации, получаем явный вид концентрационной зависимости $V(c) = V_0 \{1 + \lambda_2 p \cdot c \cdot \exp[E_1/kT]\}^{-1/2}$ (V_0 — скорость дислокации в отсутствие примесей). Это выражение совместно с (4) дают систему для самосогласованного расчета скорости движения дислокации и концентрации увлекаемых ею примесей. Исключая концентрацию и вводя безразмерные переменные, получаем замкнутое уравнение для скорости движения дислокации в виде

$$\left[\left(\frac{\tilde{v}_0}{\tilde{v}} \right)^2 - 1 \right] e^{-1/\tilde{v}} = \alpha. \quad (6)$$

Здесь $\tilde{V}_0 \equiv V(\tau_1/a)$, $\tilde{V}_0 \equiv V_0(\tau_1/a)$, $\alpha \equiv \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot c_0 \cdot e^{E_1/kT}$. Характер поведения дислокации при наличии примесей представлен на рис. 2 для нескольких значений параметров задачи. В согласии с описанной выше общей схемой подвижность дислокаций имеет порог. Условие срыва стационарного режима, следующее из (6), есть

$$\frac{2}{e} \tilde{V}_0 (\tilde{V}_0 + \sqrt{\tilde{V}_0^2 + 1}) \exp \left\{ -\frac{\sqrt{\tilde{V}_0^2 + 1}}{\tilde{V}_0} \right\} = \alpha. \quad (7)$$

Как видно из рис. 2, при малых α примеси могут практически не влиять на подвижность дислокаций в области больших напряжений и все же приводить к срыву стационарного режима движения при достижении критического значения напряжения. Такое поведение типично для нейтральных примесей в кремнии [1-5].

Критическое значение $V_0^c = V_0(\sigma_c)$, полученное из (7) для случая $\alpha \ll 1$ и записанное в размерном виде, есть

$$V_0^c \approx \frac{a}{\tau} e^{u/kT} \left[\ln \frac{1}{c_0 \exp \left\{ \frac{E_1}{kT} \right\}} \right]^{-1}. \quad (8)$$

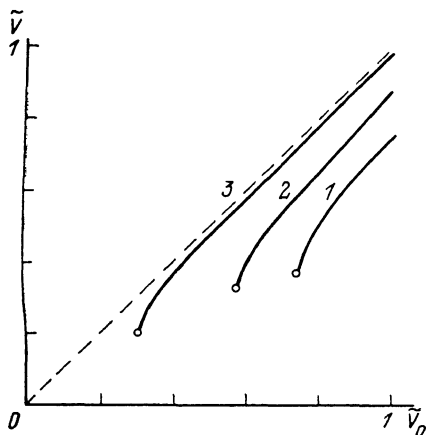


Рис. 2. Скорость дислокации при наличии подвижных примесей, выраженная как функция скорости дислокации в чистом кристалле, при различных значениях параметра.

1 — 0.2, 2 — 0.1, 3 — 0.01.

Как видно из (8), критическая скорость дислокации, а с ней вместе и пороговое напряжение растут с увеличением подвижности примесей. Это предсказание модели находится в согласии с экспериментальными данными [4, 8]. Время миграции примесей в ядре дислокации отличается от времени миграции в объеме кристалла, что затрудняет точную количественную оценку критической скорости согласно (6), однако наличие экспоненциально большого множителя $e^{u/kT}$ делает качественно понятным наблюдаемое в эксперименте большое превышение критической скорости над характерной скоростью, отвечающей максимальной силе торможения дислокации примесной атмосферой по модели Коттрелла и др. [11, 12]. Таким образом, можно заключить, что предложенная модель позволяет объяснить основные качественные черты порогового поведения подвижности дислокаций в примесных полупроводниках.

Список литературы

- [1] Никитенко В. И. // Динамика дислокаций. Киев: Наукова думка, 1975. С. 7—26.
- [2] Бондаренко И. Е., Никитенко В. И. // Проблемы прочности и пластичности твердых тел. Л.: Наука, 1979. С. 244—256.
- [3] Bondarenko I. E., Eretenko V. G., Nikitenko V. I., Yakimov E. B. // Phys. Stat. Sol. (a)-1980. Vol. 60. N 2. P. 341—349.
- [4] Макара В. А. Препринт ИЭС им. Е. О. Патона. № ИПМ-86-2. Киев, 1986. 53 с.
- [5] Sumino K., Imai M. // Phil. Mag. 1983. Vol. A47. N 5. P. 753—766.
- [6] Yonenaga I., Sumino K., Yamada K. // Appl. Phys. Lett. 1986. Vol. 48. N 5. P. 326—328.
- [7] Sumino K. // Proc. 2nd Intern. Autumn Meeting «Gettering and Defect Engineering in the Semiconductor Technology (GADEST)». DDR, 1978. P. 218—231.
- [8] Yonenaga I., Sumino K. // J. Appl. Phys., 1989. Vol. 65. N 1. P. 85—92.
- [9] Петухов Б. В. // ФТТ. 1982. Т. 24. Вып. 2. С. 439—442.
- [10] Петухов Б. В. // ЖТФ. 1989. Т. 59. Вып. 10. С. 30—34.
- [11] Коттрелл А. Х. Дислокации и пластическое течение в кристаллах. М.: Металлургия, 1958. 257 с.
- [12] Любова Б. Я. Диффузионные процессы в неоднородных твердых средах. М.: Наука, 1981. 295 с.
- [13] Мальгин Г. А. // ФТТ. 1982. Т. 24. Вып. 9. С. 2757—2762.
- [14] Петухов Б. В. // Изв. АН СССР. 1987. Т. 51. № 4. С. 708—714.
- [15] Хирт Дж., Лоте Е. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.