

- [7] B r o o m R.F., R h o d e r i c k E.H. // Brit. J. Appl. Phys. 1960. V. 11. N 7. P. 291-296; C h e r r y W.H., G i t t l e m a n J.T. // Solid-State Electron. 1960. V. 1. P. 287-305.
- [8] K e i l i n V.E., K l i m e n k o E.Yu., K r e m l e v M.G., S a m o i l o v N.B. - In: Les Champs Magnetiques Intenses, CRNS, Paris, 1967. P. 231.
- [9] A l t o v V.A., K r e m l e v M.G., S y t c h e v V.V., Z e n k e v i t c h V.B. // Cryogenics. 1973. V. 13. N 7. P. 420-422.
- [10] А л ь т о в В.А., Б л а г о в В.Б., К у л ы с о в Н.А., С ы ч е в В.В. // ДАН СССР. 1985. Т. 291. С. 1104-1107.

Всесоюзный научно-исследовательский институт метрологической службы
Москва

Поступило в Редакцию
30 сентября 1988 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 2

26 января 1989 г.

05.1

О КРИТИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ДИСЛОКАЦИЙ В МИКРОКРИСТАЛЛАХ

В.Г. Г р я з н о в, А.М. К а п р е л о в,
А.Е. Р о м а н о в

Картина физических процессов в кристалле усложняется и приобретает все большее многообразие с уменьшением его размеров [1]. Это проявляется особенно ярко, когда размеры кристалла соизмеримы с масштабом того или иного физического явления. Естественно предположить, что такого рода эффекты могут сказаться на дефектной структуре кристалла с уменьшением его размеров. Настоящее сообщение посвящено теоретическому рассмотрению дислокаций в микрокристаллах (МК). По нашему мнению, решение проблемы устойчивости дислокаций в МК и определение соответствующего размерного критерия является *terminus a quo* для дальнейшего исследования физико-механических свойств микрокристаллических веществ.

На движущуюся в кристаллической решетке дислокацию действуют силы двух типов: 1) конфигурационные силы (действие которых вызвано наличием в кристалле границ раздела и свободной поверхности, а также приложенными к поверхности кристалла внешними нагрузками [2] ; 2) силы трения решетки [3]. Известно, что дислокации являются термодинамически неравновесными дефектами,

тем не менее в макрокристалле они могут существовать бесконечно долго вследствие малости конфигурационных сил, обеспечивающих выход дислокации из объема кристалла. В МК эти силы становятся весьма заметными из-за эффективной близости свободной поверхности или границы раздела МК с окружающей матрицей.

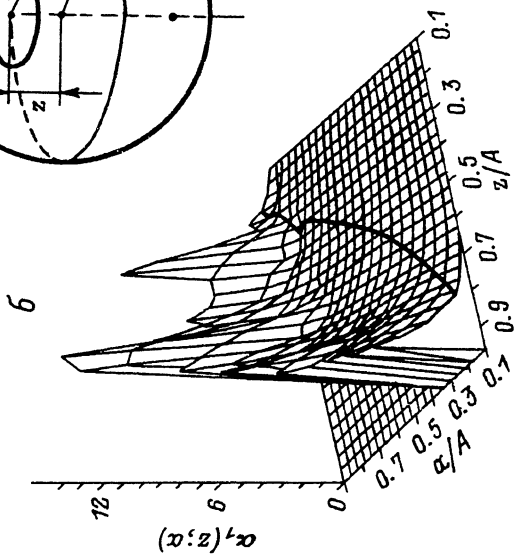
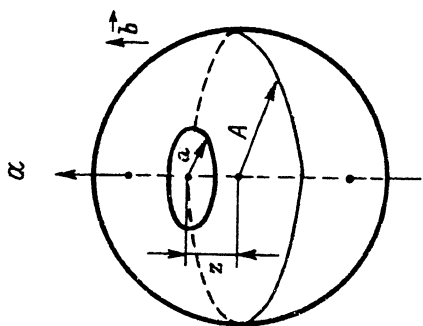
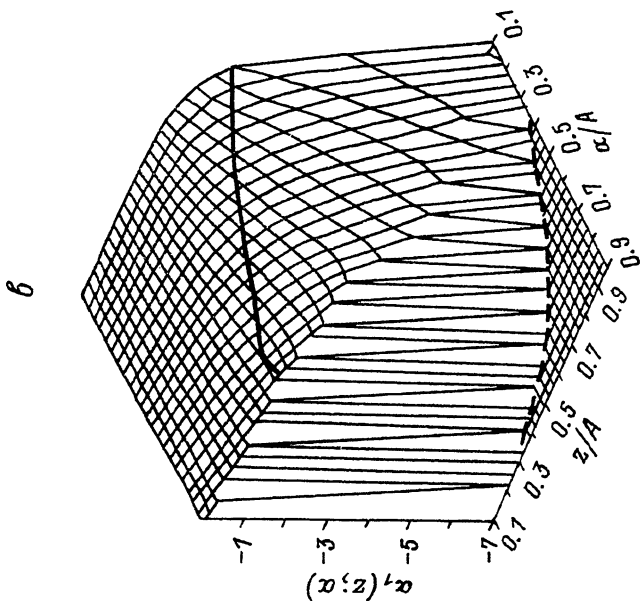
В первом приближении будем полагать, что в МК с размерами $2A$ действует напряжение „изображения“ $\sigma \approx \alpha Gb/2A$, где коэффициент α зависит, строго говоря, от геометрии дислокации и ее положения в объеме МК, G – модуль сдвига, b – величина вектора Бюргерса. Трение решетки в чистом кристалле определяется напряжением Пайерлса σ_p [3]. Поэтому, если реализуется $\sigma \approx \sigma_p$ в большей части объема МК (что приводит к оценке $\alpha = 10^{-1}-1$), плотность скользящих дислокаций в МК снижается. Это означает, что существует характерный масштаб устойчивости дислокаций l^* [4]:

$$l^* = \alpha Gb / 2\sigma_p. \quad (1)$$

При $A \leq l^*$ область метастабильности дислокаций в МК быстро начинает стремиться к нулю со снижением размера A . Соотношение (1) по виду аналогично известной формуле срабатывания дислокационного источника Франка-Рида $L = \alpha' Gb / 2\sigma_e$ [3]. Однако здесь в знаменатель входит внешнее приложенное напряжение σ_e , а не σ_p . Поэтому, если формула Франка-Рида дает ограничение сверху на длину L сегментов дислокаций, устойчивых в поле напряжений σ_e , то соотношение (1), наоборот, – на нижний размер МК l^* , при котором область устойчивого состояния дислокаций еще является доминирующей в объеме МК. Оценки показывают, что для типичных параметров большинства металлов величина $l^* = 10^2 b - 10^3 b$. Для частичных дислокаций соотношение (1) несколько видоизменяется: $l^* = \alpha Gb' / 2(\sigma_p' - \gamma/b')$, здесь b' – вектор Бюргерса частичной дислокации, γ – энергия дефекта упаковки. Отсюда следует, что из объема МК, как правило, первыми должны выходить частичные дислокации, а когда величина γ мала (т.е. $\sigma_p' \gg \gamma/b'$) первыми покинут объем МК полные дислокации (при условии $b'/b < \sigma_p'/\sigma_p$).

В области очень малых размеров МК $A \ll l^*$ в них возможно появление дислокаций и других дефектов под действием приобретаемого частицей электрического заряда q [4, 5] (например, в результате электрострикции или излучения). Действие электростатических сил превосходит предел текучести, когда размер A становится меньше характерного масштаба $l^{**} = (q^2 / \theta Gb)^{1/2}$ где коэффициент $\theta = 10^{-1}-10^{-2}$. В типичном случае для $\bar{q} = 1 \cdot e$ (e – заряд электрона) значение $l^{**} \approx 10$ Б, что соответствует результатам [5].

Рис. 1. Модель призматической дислокационной петли в МК: а) случай аксиальной симметрии, б) зависимость $\alpha_1 = \alpha_1(x, a)$ для задачи Неймана, в) то же для задачи Дирихле. На рисунках (б) и (в) указаны линии уровня $|\alpha_1| = 1$. Штриховая линия соответствует границе области определения коэффициента α_1 .



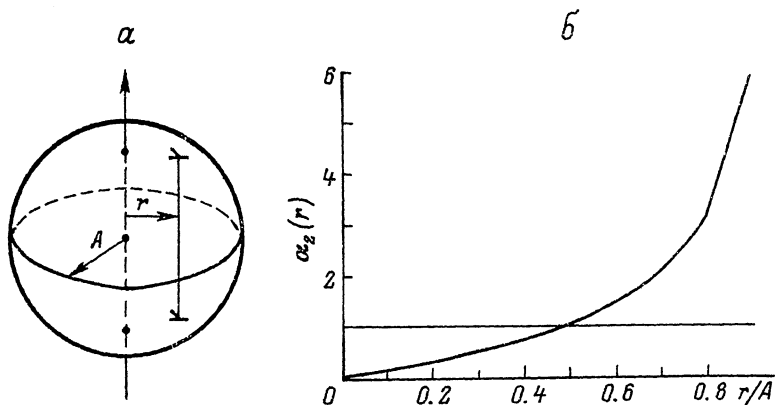


Рис. 2. Модель линейной краевой дислокации в МК: а) вектор Бюргера в дислокации параллелен радиус-вектору \mathbf{r} , б) зависимость $\alpha_2 = \alpha_2(r)$.

Детальное описание устойчивости дислокаций в МК может быть достигнуто с помощью расчетов упругих полей и энергий дефектов с учетом реальных граничных условий на поверхности МК. Ниже приводятся результаты расчетов для двух физически наиболее интересных случаев: 1) для призматической дислокационной петли (рис. 1, а); 2) для прямолинейной дислокации (рис. 2, а). Обычно для МК характерна округлая форма, поэтому для наших целей естественной аппроксимацией МК может служить упругий шар.

Линейная изотропная теория упругости допускает точное решение граничной задачи для призматической дислокационной петли радиуса в положении с аксиальной симметрией (рис. 1, а). Вычисления в соответствии с [6] дают напряжение σ_{zr} (в цилиндрических координатах r, z при $r = a$), действующее на элемент петли, которая смещена на расстояние z от центра шара:

$$\sigma_{zr} = \alpha_1(z, a) \frac{Gb}{2A}, \quad (2)$$

где

$$\alpha_1 = \frac{a}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ a'_n \left[-2n P'_{n-2} \left(\frac{z}{R} \right) \right] \left(\frac{R}{A} \right)^{n-2} + b'_n \left[-2n P'_{n-2} \left(\frac{z}{R} \right) + 4 \frac{2-n+\nu(2n-1)}{n+5-4\nu} \left(2n P'_{n-1} \left(\frac{z}{R} \right) - P'_n \left(\frac{z}{R} \right) \right) \right] \left(\frac{R}{A} \right)^n \right\}.$$

Здесь $R = \sqrt{a^2 + z^2}$, ν - коэффициент Пуассона, $P_n(x)$ - полином Лежандра порядка n , $P'_n(x)$ - его производная, а коэффициенты a'_n и b'_n находятся из граничных условий на поверхности шара. Точный вид a'_n и b'_n дан в работе [6] для шара со свободной поверхностью

(задача Неймана). Для этих граничных условий на рис. 1, б приведен график функции $\alpha_1(z, a)$. В предельном случае $z \ll A$ и $a \ll A$ (дислокационная петля вблизи плоской свободной поверхности) (2) согласуется с результатами [7]. Для задачи Дирихле (МК когерентно связан с жесткой матрицей) соответствующий результат приведен на рис. 1, в.

Решение задачи для краевой прямолинейной дислокации в упругом шаре (рис. 2, а) получить сложнее из-за отсутствия аксиальной симметрии. Тем не менее можно определить область, в которой будет находиться зависимость упругой энергии E дислокации [4] от расстояния до центра шара r , если обратить внимание на то, что упругое состояние, создаваемое краевой дислокацией в шаре, является промежуточным между плосконапряженным (диск) и плоскодеформированным (цилиндр) состояниями [4, 8]. Приняв, что энергия E соответствует середине указанной области, можно описать зависимость искомого напряжения $\sigma_{\varphi r}$, действующего на дислокацию в плоскости скольжения $\varphi = 0$, от r следующим соотношением:

$$\sigma_{\varphi r} = \frac{1}{b \sqrt{A^2 - r^2}} \cdot \frac{\partial E}{\partial r} = \frac{\alpha_2(r) G b}{2A}, \quad (3)$$

где $\alpha_2 = \frac{2 - \nu^2}{4\pi(1 - \nu)} \cdot \frac{rA}{A^2 - r^2} \left[2\nu \frac{A^2 - r^2}{Ar_c} + 2 \right]$, $A - r \gg r_c$.

Здесь r_c - радиус ядра дислокации, а график функции $\alpha_2(r)$ дан на рис. 2, б.

Две рассмотренные модели качественно и количественно удовлетворительно согласуются с приближенной оценкой для ζ^* и содержат характерную размерную зависимость напряжения, действующего на дефект, $\sigma \sim A^{-1}$.

Таким образом, на основе проведенного анализа можно сделать вывод о том, что при достижении свободным микросталлом характерного размера $\zeta^* = \frac{\alpha G b}{2\sigma_p} = 10^2 - 10^3$ А вероятность существования подвижных дислокаций резко снижается. Если же МК, напротив, находится в жесткой матрице, то плотность дислокационных дефектов в нем повышается, т.к. дислокации эффективно удерживаются в МК (отрицательный знак коэффициента α на рис. 1, в). Эти выводы могут быть проверены экспериментально, несмотря на существенные методические трудности.

Авторы благодарны за полезные обсуждения А.Р. Архипову, Ю.Я. Богуславскому, И.М. Кагановой, А.Н. Орлову, В.А. Соловьеву и Л.И. Трусову.

Л и т е р а т у р а

- [1] Морохов И.Д., Трусов Л.И., Лапавок В.Н. Физические явления в ультрадисперсных средах. М.: Энергоатомиздат, 1984. 224 с.

- [2] Э ш е л б и Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: ИИЛ, 1963. 247 с.
- [3] Х и р т Дж., Л о т е И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
- [4] Г р я з н о в В.Г., К а п р е л о в А.М., Р о м а н о в А.Е. В кн.: Дисклинации и ротационная деформация твердых тел. Л.: ФТИ, 1988, с. 51-89.
- [5] I i j i m a S. In : Microclasters (Springer Series in Materials Science, vol. 4), Heidelberg, Springer-Verlag, 1987, p. 181-189.
- [6] W i l l i s J.R., B u l l o u g h R., S t o n e h a m A.M. // Phil. Mag. A. 1983. V. 48. N 1. P. 95-107.
- [7] B a s t e c k a J. // Czech. J. Phys. 1964. v. 14, B. N 6. P. 430-442.
- [8] D u n d u r s J., M a r k s Z.D., A j a y a n P.M. // Phil. Mag. A. 1988. V. 57. N 4. P. 605-620.

Поступило в Редакцию
17 октября 1988 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 2

26 января 1989 г.

05.1; 11

ПЛЕНКИ КУБИЧЕСКОГО КАРБИДА КРЕМНИЯ НА КРЕМНИЕВОЙ ПОДЛОЖКЕ

Л.И. Б е р е ж и н с к и й, С.И. В л а с к и н а,
В.Е. Р о д и о н о в, Х.А. Ш а м у р а т о в

Карбид кремния представляет собой перспективный материал для создания приборов интегральной электроники и оптоэлектроники. Однако при этом требуются монокристаллические слои большой площади. Технология получения кристаллов SiC очень сложная, размеры получаемых кристаллов невелики. Поэтому усилия многих исследователей направлены на разработку получения кристаллических пленок SiC на инородных подложках [1, 2].

В настоящем сообщении приводятся результаты исследования морфологии и структуры пленок $\beta-SiC$, полученных методом химического осаждения паров (CVD-метод) на подложку Si . Пары Si и C получали путем термического разложения газа метилтрихлорсилана (МТХС) в потоке водорода при температуре около $1400^\circ C$ [3].