

- [5] Закис Ю. Р., Зайкатс В. П. // Уч. зап. Латв. ГУ. 1973. В. 1. С. 187—196.
 [6] Gummer G. // Z. Phys. 1968. Bd 215. N 1. S. 256—278.
 [7] Hennl P. // Phys. St. Sol. (a). 1978. V. 46. P. 147—152.
 [8] Алексеева Л. И., Брюквин В. В., Марчук С. Н. и др. // Тез. докл. Всес. конф. по физике диэлектриков. Секция «Процессы электропереноса». Баку, 1982. С. 49—61.
 [9] Susuki K. // J. Phys. Soc. Jap. 1961. V. 16. N 1. P. 67—78.

Иркутский государственный университет
 НИИ прикладной физики

Поступило в Редакцию
 22 июня 1990 г.

УДК 548.4 : 535.343.2

© Физика твердого тела, том 32, № 12, 1990
 Solid State Physics, vol. 32, N 12, 1990

ОПТИЧЕСКИЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ ПРИМЕСИ С ДИСЛОКАЦИЕЙ

М. И. Молоцкий

В 1982 г. Сумино с сотрудниками [1] обнаружили длинноволновый сдвиг полос ИК поглощения атомов кислорода в кремнии, возникающий после пластической деформации кристалла, но не дали какого-либо объяснения этого эффекта. В настоящей работе предложен механизм сдвига и показано, что его можно использовать для нахождения важнейшего параметра, определяющего пластичность реальных кристаллов, — энергии связи примеси с дислокацией.

При пластической деформации кристаллов наряду с дислокациями возникает большое число точечных дефектов, способных изменить колебательный спектр примесей. Однако в опытах [1] деформация кремния проводилась при высокой температуре (900 °С), при которой точечные дефекты быстро отжигались. Поэтому в дальнейшем будем учитывать только роль дислокаций. В этом случае можно предложить следующий механизм смещения полос поглощения. Кислород в кремнии является примесью внедрения. Такие примеси затягиваются упругими силами в область недостающей полуплоскости, в которой решетка растянута. Ангармонические эффекты приводят к уменьшению частоты локального колебания в области растяжения, что позволяет объяснить сдвиг частот, наблюдаемый в работе [1].

Определим величину сдвига. В модели Грюнайзена сдвиг частот пропорционален частоте локального колебания примеси ω_0 и дилатации решетки Δ [2]

$$\delta\omega = -\gamma_0\omega_0\Delta, \quad (1)$$

где γ_0 — постоянная Грюнайзена локального колебания. Дилатация решетки вблизи краевой дислокации может быть представлена в виде

$$\Delta(\rho, \varphi) = \Delta_0(b/\rho) \cos \varphi, \quad (2)$$

b — величина вектора Бюргерса; Δ_0 — дилатация решетки вблизи оси дислокации; ρ, φ — полярные координаты. Аналогичный вид имеет энергия упругого взаимодействия примеси с дислокацией

$$U(\rho, \varphi) = -U_0(b/\rho) \cos \varphi. \quad (3)$$

Выражения (2), (3), полученные в рамках континуальной теории упругости, расходятся, как обычно, при $\rho \rightarrow 0$. Для устранения расходимостей их необходимо обрезать при $\rho \simeq b$.

Взаимодействие (3) примесей с дислокацией приводит к их перераспределению. Вблизи дислокации концентрация примесей равна

$$c(\rho, \varphi) = c_0 e^{-U(\rho, \varphi)/kT}, \quad (4)$$

c_0 — концентрация вдали от дислокации. Если дислокации хаотично распределены в кристалле с плотностью Λ_d , то, усредняя сдвиг (1) по распределению (4), получаем

$$\overline{\delta\omega/\omega_0} = -2\pi b^2 \gamma_0 \Lambda_d \Delta_0 L(U_0/2kT), \quad (5)$$

где

$$L(x) = x \left(4\pi + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^{2n}}{n!(n+1)!2n} \right).$$

Вид функции $L(x)$ представлен на рисунке.

Используем результаты опытов [1] для определения энергии связи кислорода с дислокацией в кремнии. В опытах [1] кристалл деформировался при высокой температуре 1173 К, а затем быстро охлаждался до комнатной, при которой проводились измерения спектров поглощения. Поскольку энергия активации диффузии кислорода в кремнии велика (~ 2.6 эВ), то при быстром охлаждении примеси не успевают сместиться и их распределение в поле дислокации соответствует высокой температуре.

При деформации $\varepsilon = 33\%$ локальное колебание с частотой $\omega_0 = 1106 \text{ см}^{-1}$ смещается в среднем на величину $\overline{\delta\omega} = -76 \text{ см}^{-1}$. При этом плотность дислокаций $\Lambda_d = 2.3 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$, $b = 3.84 \text{ \AA}$, $\Delta_0 \approx 0.1$. Наибольшие трудности возникают при корректном выборе значения γ_0 . Как показано в [2], значение постоянной

Грюнайзена для резонансных колебаний примесей в щелочных галоидах иногда на порядок превышает соответствующее значение для идеального кристалла. Нам неизвестны какие-либо эксперименты по определению постоянной γ_0 для высокочастотного колебания $\omega_0 = 1106 \text{ см}^{-1}$ кислорода в кремнии. Однако опыты [3] по сдвигу низкочастотных резонансных колебаний этой примеси при деформации показывают, что значение γ_0 близко к двум. Поэтому будем считать $\gamma_0 = 2$. Поскольку получаемое значение U_0 логарифмически слабо зависит от γ_0 , то возможная ошибка в выборе γ_0 вряд ли заметно повлияет на конечный результат.

При принятых значениях параметров из (5) получаем $L(x_0) = 1.6 \times 10^4$. Как видно из рисунка, такое значение L соответствует $x_0 = 7.2$ и $U_0 = 2x_0 kT = 1.45 \text{ эВ}$. Полученное значение U_0 является разумным для энергии связи междоузельной примеси с дислокацией в полупроводнике (см. обзор [4]).

Приношу благодарность В. И. Никитенко за полезное обсуждение работы и М. В. Гольдфарбу за построение графика функции $L(x)$.

Список литературы

- [1] Koguchi M., Yonenaga I., Sumino K. // Jap. J. Appl. Phys. 1982. V. 21. N 7. P. L411—L413.
- [2] Benedek G., Nardelli G. F. // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 16. N 12. P. 517—519.
- [3] Hayes W., Bosomworth D. R. // Phys. Rev. Lett. 1969. V. 23. N 15. P. 851—854.
- [4] Sumino K. // Defects and Properties of Semiconductors: Defect Engineering. KTK Scientific Publishers. Tokyo, 1987. P. 227—259.

Воронежский государственный университет
им. Ленинского комсомола

Поступило в Редакцию
2 июля 1990 г.