

07,03

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

© Ю.Ю. Логинов¹, А.В. Можжерин², 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 Ar^+ 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).

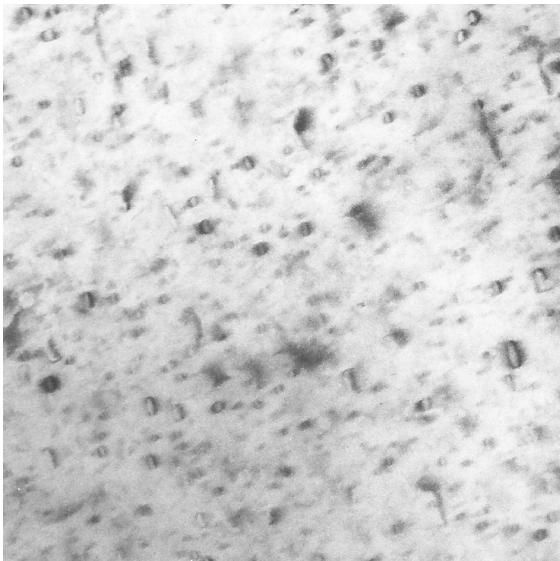


Рис. 1. Образование дислокационных петель в CdTe в результате ионного травления тонкой фольги ионами Ag^+ с энергией 5 keV в течение 15 min. Светлопольное ПЭМ-изображение в рефлексе 220.

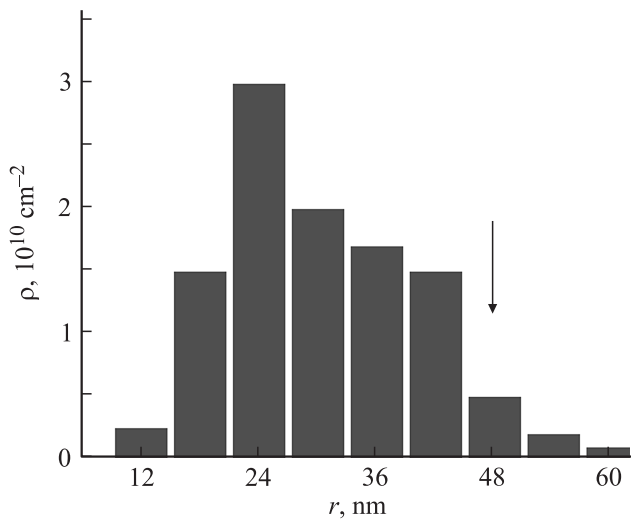


Рис. 2. Зависимость плотности ρ дислокационных петель от их размера r .

Известно, что процесс образования полной дислокационной петли с вектором Бюргера $\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$ в ГЦК-кристаллах можно представить как результат взаимодействия частичных дислокаций Шокли и Франка с векторами Бюргера $\frac{a}{2}\langle 112 \rangle$ 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 ($E_{l, \text{perfect}}$) включает в себя энергию дефекта упаковки дислокационной

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

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

где

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

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

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

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

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

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

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]

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

где

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

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

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

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

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. Вотинов, О.П. Максимикин. *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 A₂B₆*. 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).