06;08

Дислокационный ангармонизм в кремнии

© *А.А. Скворцов, А.М. Орлов, К.Е. Никитин, О.В. Литвиненко*

Ульяновский государственный университет
E-mail: scvor@sv.uven.ru

Поступило в Редакцию 25 апреля 2000 г.

Проведено исследование влияния дислокационного ангармонизма на изменение модуля Юнга при изгибе монокристаллов кремния. Показано, что наблюдаемое изменение обусловлено вкладом дислокаций в модули упругости четвертого порядка. Экспериментально обнаружено, что деформация изгибом как донорного, так и акцепторного кремния способствует появлению преимущественно краевых дислокаций с углом между вектором Бюргерса и осью дислокации $\theta \sim 90^\circ$.

Как известно, распространение упругих волн в конденсированной среде несет информацию об их скорости, потерях энергии, дефектной структуре и т. д. По данным измерения скорости и удельной плотности могут быть определены упругие константы среды, которые в свою очередь связаны с межатомными силами [1–3]. Изменение модулей упругости твердых тел может происходить при различных технологических операциях, связанных с появлением дефектов. К примеру, наличие в среде дислокаций приводит к значительным изменениям нелинейных модулей упругости, зависящих от вида и особенностей дислокационной структуры, что неоднократно подтверждалось на примере металлов [3,4]. Однако дислокационный ангармонизм полупроводников практически не рассмотрен, хотя линейные дефекты в них образуются как при росте кристаллов, так и при эксплуатации полупроводниковых приборов и интегральных микросхем. Поэтому целью данной работы явилось изучение взаимосвязи дислокационной структуры с ангармонизмом в кремнии при деформации кристалла.

Опыты проводились на ориентированных в направлении [111] бездислокационных кремниевых пластинах n- и p-типа проводимости с фиксированным значением удельного сопротивления ρ. Диапазон исследуемых ρ лежал в пределах $10-0.01\,\Omega \cdot$ cm. Краевые дислокации вводились путем отжига пластин под нагрузкой в направлении [111] при температуре 1000°C в течение 30 min [5]. Плотность дислокаций составляла 10^4–$10^6\,\mathrm{cm}^{-2}$ и для каждого объекта была фиксирована.

Влияние дислокационного ангармонизма на изменение модуля Юнга E_0 регистрировалось при изгибе монокристаллов кремния. Для анализа использовались нелинейный закон Гука для твердых тел

$$\sigma = E_0\varepsilon + \alpha\varepsilon^2 + \beta\varepsilon^3 \tag{1}$$

и вытекающая из него упругая энергия единицы объема кристалла

$$W = \frac{1}{2}E_0\varepsilon^2 + \frac{1}{3}\alpha\varepsilon^3 + \frac{1}{4}\beta\varepsilon^4. \tag{2}$$

Здесь и далее α, β — линейные комбинации модулей упругости третьего и четвертого порядков соответственно (Pa), ε — упругая деформация.

Модуль α в (2) является коэффициентом при нечетной степени упругой деформации, поэтому знакопеременный вклад этого члена в упругую энергию зависит от знака ε. Например, в случае прогиба "верхняя" половина пластины испытывает сжатие относительно нейтрального слоя ($\alpha\varepsilon^3 < 0$), а "нижняя" — растяжение ($\alpha\varepsilon^3 > 0$), так что усреднение по сечению дает нуль [6].

В отличие от этого в слагаемом с β любая знакопеременная деформация приводит к одному и тому же изменению W. При расчете вклада дислокаций в нелинейные модули необходимо учитывать решеточный β_p, дислокационный β_d и концентрационный[1] β_c ангармонизм:

$$\beta = \beta_p + \beta_d + \beta_c, \tag{3}$$

причем, согласно [4], при наличии дислокационной структуры

$$\beta_d = -\frac{(1 + 3\nu - 7\nu\sin^2\theta)N_d^- L^4\Omega^4 E_0^4}{160(1 + \nu - 3\nu\sin^2\theta)^4 b^2 g^3 \mu^3} \tag{4}$$

и $\beta_p \ll \beta_d$. Здесь Ω — ориентационный фактор; μ — модуль сдвига; g — безразмерный коэффициент, характеризующий размеры упругого поля дислокации; N_d, L — плотность и длина дислокаций соответственно; $\nu = 0.27$ — коэффициент Пуассона кремния [3]; θ — угол между вектором Бюргерса b и осью дислокации.

---

[1] Под концентрационным ангармонизмом понимается вклад свободных носителей заряда в нелинейный модуль упругости β.

Для краевой дислокации в кремнии знак модуля $\beta \approx \beta_d$ положителен, а при преобладании винтовой компоненты — отрицателен. Поэтому измеряя значение β дислокационного образца с малой концентрацией носителей заряда, можно судить о характере линейных дефектов в полупроводнике.

Для экспериментальной проверки знака β нами использовался метод составного вибратора. К торцам пластин приклеивались пьезокерамические датчики с двумя металлизированными гранями, что позволяло возбуждать в пластине нулевые моды волн Лэмба в направлении [110]. Ширина датчиков максимально приближалась к ширине пластины $(400-500\,\mu\text{m})$. Длина датчиков составляла $6-8$ mm.

Изгиб образцов вдоль направления [111] производился на специально изготовленном приспособлении с шаровыми опорами диаметром 0.5 mm. Прогиб пластин фиксировался микрометром с точностью $\pm 2.5\,\mu$m. Максимальный прогиб кристалла в центре пластины составлял $800\,\mu$m при общей длине пластины 60 mm. При больших деформациях наступало полное разрушение образцов.

Исследуемая пластина включалась в цепь обратной связи ВЧ-резонансного усилителя. Для контроля амплитуды резонансной частоты использовались осциллограф С1-83 и частотомер РЧ3-07-0002. Измерение деформационной зависимости скорости упругой волны полупроводника проводилось в диапазоне $3-7$ MHz. Вначале колебательный контур настраивался на резонасную частоту с последующей 3-минутной выдержкой во включенном состоянии для установления теплового равновесия и уменьшения дрейфа резонансной частоты. Далее снимались показания частотомера при нагрузке и разгрузке кристаллов. Относительное изменение частоты по причине дрейфа параметров внешней среды не превышало 10^{-5}.

Если в подвергающейся трехточечному изгибу полупроводниковой кремниевой пластине длиной L_{PL} и толщиной h_{PL} возбудить продольные колебания, то полная деформация будет складываться из колебательной ε_k и статической ε_0 деформаций. Параметры колебаний в этом случае будут характеризоваться динамическим модулем

$$E_d = E_0\left(1 + \left(\frac{3\beta}{2E_0} - \frac{\alpha^2}{E_0^2}\right)\frac{h_{PL}^2}{6r_{PL}^2}\right). \tag{5}$$

Здесь радиус кривизны r_{PL}^2 при малом прогибе определяется второй производной от профиля пластины $y(x)$. Для используемой схемы нагружения с фиксируемым расстоянием P между опорами профиль пластины описывается известной функцией [4]

$$y(x) = d\left(-\frac{4x^3}{p^3} + \frac{6x^2}{p^2} - 1\right). \tag{6}$$

Здесь d — стрела прогиба.

Для определения модулей упругости нами использовалась измерительная схема, представляющая собой автогенератор с условием резонанса, определяемым суммарной фазой

$$\varphi = 2\pi f \int\limits_{-L/2}^{L/2} \frac{dx}{\nu(x)} = \frac{2\pi f}{\nu_0} \int\limits_{-L/2}^{L/2} \frac{dx}{\sqrt{\left(1 + \left(\frac{3\beta}{2E_0} - \frac{\alpha^2}{E_0^2}\right)\frac{h^2}{6r_{PL}^2}\right)}} = 2\pi N,$$

$$N = 1, 2, 3 \dots \tag{7}$$

Здесь $\nu = \sqrt{\frac{E}{d_{\mathrm{Si}}}}$ — скорость звука в кристалле, d_{Si} — плотность кремния.

Интегрирование этого уравнения с учетом (5) и (6) позволяет получить выражение для относительного изменения частоты генерации $\Delta f = f - f_0$ ультразвуковых сигналов колебательной системы с деформируемой пластиной:

$$\frac{\Delta f}{f} \approx \frac{df}{f} = 4\frac{h_{PL}^2}{p^3 L_{PL}}(\Delta d)^2\left(\frac{3\beta}{2E_0} - \frac{\alpha^2}{E_0^2}\right). \tag{8}$$

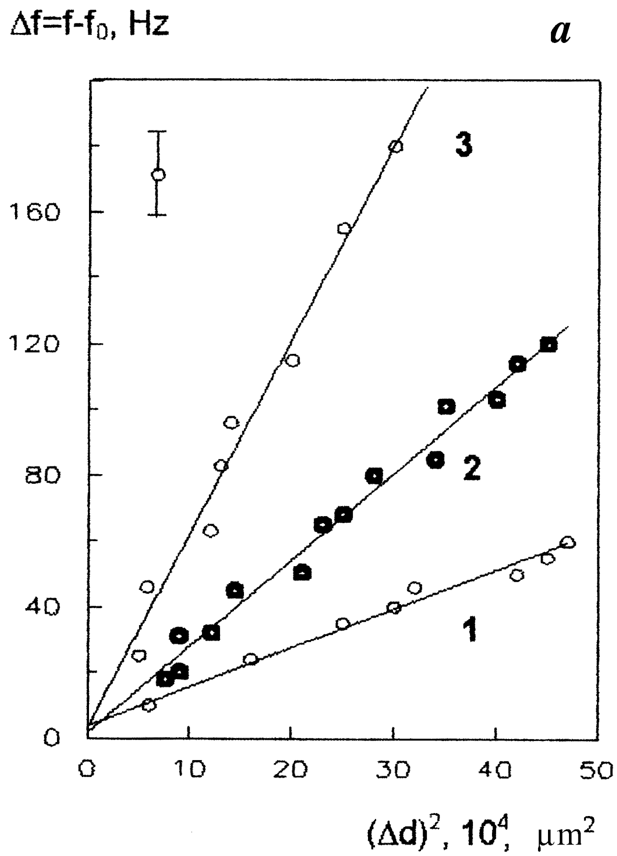
Здесь f_0, d_0 — частота автогенерации и стрела прогиба при отсутствии деформации; f, d — то же самое при деформации изгибом; $\Delta d = d - d_0$.

Для удобства последующего анализа представим (8) с учетом (3) в виде соответствующих уравнений:

$$\left\{\frac{\Delta f}{(\Delta d)^2}\right\}_S = 4\left(\frac{h_{PL}^2}{p_{PL}^3 L_{PL}}\right)_S f_S \left[\frac{3\beta_S}{2E_0}\right], \tag{9}$$

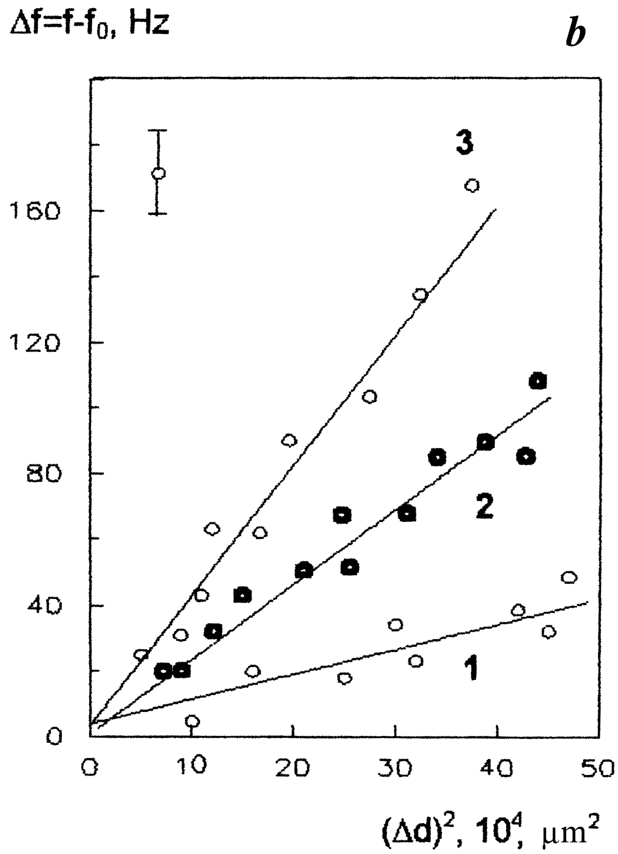
$$\left\{\frac{\Delta f}{(\Delta d)^2}\right\}_d = 4\left(\frac{h_{PL}^2}{p_{PL}^3 L_{PL}}\right)_d f_d \left[\frac{3\beta_d}{2E_0}\right] \tag{10}$$

для бездислокационного (подстрочный индекс "S") и дислокационного ("d") кремния, в которых учтено отсутствие слагаемого с α при изгибе образцов.



Влияние стрелы прогиба d на изменение частоты колебаний: *a* — легированных фосфором образцов ($\rho = 10\,\Omega \cdot \mathrm{cm}$) с различной плотностью дислокаций: *1* — $8 \cdot 10^4\,\mathrm{cm}^{-2}$; *2* — $7 \cdot 10^5\,\mathrm{cm}^{-2}$; *3* — $2 \cdot 10^6\,\mathrm{cm}^{-2}$; *b* — легированных бором образцов ($\rho = 20\,\Omega \cdot \mathrm{cm}$) с различной плотностью дислокаций: *1* — $1 \cdot 10^5\,\mathrm{cm}^{-2}$; *2* – $5 \cdot 10^5\,\mathrm{cm}^{-2}$; *3* — $1 \cdot 10^6\,\mathrm{cm}^{-2}$

Нетрудно видеть, что правые части уравнений (9) и (10) определяют тангенс угла наклона экспериментальных кривых, построенных в координатах $\Delta f \sim (\Delta d)^2$, а их разность дает величину дислокационного



(*Продолжение рисунка*).

вклада в измеряемый модуль:

$$\Delta\beta = \beta_d - \beta_S$$

$$= \frac{E_0}{6f_d}\left(\frac{p_{PL}^3 L_{PL}}{h_{PL}^2}\right)_d \left(\frac{\Delta f}{\Delta d^2}\right)_d - \frac{E_0}{6f_S}\left(\frac{p_{PL}^3 L_{PL}}{h_{PL}^2}\right)_S \left(\frac{\Delta f}{\Delta d^2}\right)_S. \qquad (12)$$

Дислокационный вклад в соответствующий модуль может быть получен сравнением $\Delta\beta$ образцов с различной плотностью дислокаций N_d. При этом исключаются эффекты, связанные с вкладом свободных носителей в нелинейный модуль β.

Типичные результаты этих исследований представлены на рисунке. Они свидетельствуют о том, что для дислокационной структуры *n*- и *p*-кремния $\beta > 0$. Следовательно, краевой характер изучаемых дислокаций является определяющим.

Таким образом, установлено что, используемые режимы деформации как донорного, так и акцепторного кремния способствуют появлению преимущественно краевых дислокаций с углом между вектором Бюргерса и осью дислокаций $\theta \sim 90^\circ$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минвуза "Деградационные процессы в многослойных тонкопленочных структурах" и гранта РФФИ № 98–02–03335.

Список литературы

[1] *Судзуки Т., Есинага Х., Такеути С.* Динамика дислокаций и пластичность. М.: Мир, 1989. 296 с.
[2] *Фридель Ж.* Дислокации. М.: Мир, 1967. 626 с.
[3] *Физическая* акустика / Под ред. У. Мэзона. 1969. Т. 4. Ч. А. 344 с.
[4] *Никитин К.Е.* // ФТТ. 1994. № 12. С. 3587–3595.
[5] *Орлов А.М., Скворцов А.А., Фролов В.А.* // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 3. С. 28–32.
[6] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория упругости. М.: Физматлит, 1965. 204 с.