

05

Краевые дислокации с большим вектором Бюргерса в структуре сфалерита

© А.Н. Буйлов, Л.Н. Данильчук

Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого
E-mail: depoeef@novsu.ac.ru

Поступило в Редакцию 15 апреля 2002 г.

Методом рентгеновской дифракционной топографии на основе эффекта Бормана исследовалась дислокационная структура монокристаллитов арсенда галлия, выращенных методом Чохральского в направлении [001] и легированных индием. Было установлено, что среди ростовых дислокаций, расположенных в слитке вдоль оси роста, наблюдаются дислокации с большими векторами Бюргерса $\mathbf{b} = a\langle 100 \rangle$ и плоскостью скольжения $\{100\}$.

Современная технология выращивания полупроводниковых соединений A_3B_5 позволяет получать монокристаллы GaAs с полуизолирующими свойствами и низкой плотностью дислокаций. Один из таких слитков GaAs, выращенный в ГИРЕДМЕТ, и был объектом рентгенотопографического анализа.

Монокристалл GaAs(In) имел удельное сопротивление $2.1 \times 10^8 \Omega \cdot \text{cm}$, подвижность электронов $4970 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ и среднюю плотность дислокаций $N_D = 1 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-2}$. Из слитка перпендикулярно оси роста [001] были вырезаны плоскопараллельные пластины толщиной около $300 \mu\text{m}$. Для получения рентгенотопограмм использовался лауэвский случай дифракции, характеристическое CuK_α -излучение и отражения $\{220\}$, $\{400\}$, $\{440\}$ от систем плоскостей, перпендикулярных поверхности пластин (001). При указанных выше толщинах пластин критерий $\mu \cdot t \approx 12$, где μ — линейный коэффициент поглощения рентгеновских лучей (cm^{-1}), t — толщина кристалла (cm), что соответствует в динамической теории рассеяния рентгеновских лучей приближению „толстого“ кристалла. В этом случае дефекты в объеме кристалла могут быть зафиксированы на рентгенотопограмме лишь при использовании эффекта Бормана [1].

Известно [2–4], что при распространении волнового рентгеновского поля в случае эффекта Бормана вдоль оси краевой дислокации на

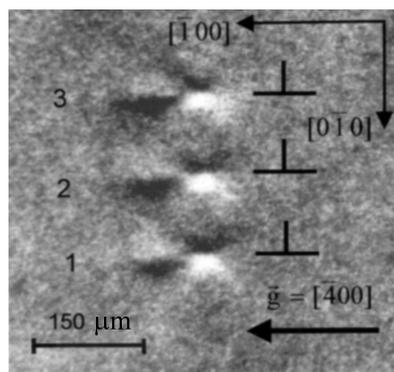


Рис. 1. Экспериментальная топограмма краевых дислокаций в GaAs(In) с большими векторами Бюргера в отраженном пучке лучей (позитив).

фотопластинке, установленной за кристаллом, будет зафиксирована многолепестковая черно-белая розетка интенсивности, отображающая поле деформаций вокруг дислокации [5].

По этой розетке можно получить всю информацию о дислокации: кристаллографическом направлении оси, типе дислокации, положении экстраполуплоскости и плоскости скольжения (в случае краевой дислокации), направлении, знаке и величине вектора Бюргера.

На рис. 1 представлены фрагмент топограммы с группой одноименных краевых дислокаций 1, 2, 3, зарегистрированных в отраженном пучке лучей при использовании отражения $(\bar{4}00)$. Подобные по профилю розетки интенсивности регистрировались раньше при исследованиях по методу аномального прохождения рентгеновских лучей (АПРЛ) монокристаллов кремния [2], германия [3] и карбида кремния [6].

Если при рентгенотопографировании краевых дислокаций реализуется критерий контраста $(\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}) = 2; 4$, где \mathbf{g} — вектор дифракции, \mathbf{b} — вектор Бюргера, и вектор Пойнтинга в кристалле точно совпадает с осью дислокации, то на топограмме регистрируется симметричная 10-лепестковая черно-белая розетка интенсивности с линией нулевого контраста, лежащей в плоскости скольжения. Четыре центральных лепестка розетки формируются собственным полем дислокации (полем деформаций в объеме кристалла), а остальные лепестки —

релаксационным полем вблизи поверхности выхода лучей [4]. Зона сжатия вблизи экстрополуплоскости на топограмме характеризуется положительным контрастом (два центральных черных лепестка), а зона разрежения ниже экстрополуплоскости — отрицательным контрастом (два центральных белых лепестка розетки).

Дислокационные розетки интенсивности на рис. 1 — шестилепестковые. Четыре центральных лепестка розетки сформированы собственным полем дислокаций, два лепестка слева сформированы релаксационным полем. Такая асимметрия розетки обусловлена влиянием анизотропии упругих свойств кристалла вблизи его свободной выходной поверхности. Из рис. 1 видно также, что все три дислокации имеют плоскости скольжения $(0\bar{1}0)$. Зоны сжатия вблизи экстрополуплоскостей характеризуются положительным контрастом ($J_D = J_T > J_0$). Следовательно, дислокации 1, 2, 3 имеют одинаковые по направлению и знаку векторы Бюргерса. И так как диаметры розеток одинаковые, то и величины всех трех векторов Бюргерса также являются одинаковыми, т. е. $\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_3 = na[\bar{1}00]$.

Исходя из принципа минимизации энергии дислокаций, можно предположить, что дислокации 1, 2, 3 имеют векторы Бюргерса $\mathbf{b} = a[\bar{1}00]$.

Чтобы подтвердить или опровергнуть это предположение, было проведено компьютерное моделирование контраста интенсивности и построено изображение краевой дислокации с осью $[001]$, плоскостью скольжения (010) и вектором Бюргерса $|\mathbf{b}| = a[\bar{1}00] = 5.65 \cdot 10^{-4} \mu\text{m}$.

Расчет проводился по уточненным и модифицированным на случай АПРЛ уравнениям Инденбома-Чамрова для электронно-микроскопического контраста [7,4]:

$$\left. \begin{aligned} \delta_D &= \frac{J_D - J_D^0}{J_D^0} = -\frac{W_{2a} + W_{2b}}{\gamma_2} \\ \delta_T &= \frac{J_T - J_T^0}{J_T^0} = -\frac{W_{2a} - W_{2b}}{\gamma_2} \end{aligned} \right\}. \quad (1)$$

Здесь J_D, J_T — интенсивности отраженной и прямой волн в данной точке изображения; $J_D^0 = J_T^0 = J_0$ — фоновая интенсивность (интенсивность в неискаженном кристалле); W_{2a}, W_{2b}, γ_2 — параметры, характеризующие деформацию отражающих плоскостей у поверхности

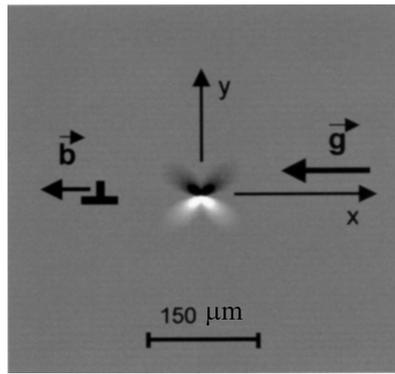


Рис. 2. Теоретическая топограмма краевой дислокации с большим вектором Бюргерса, построенная с учетом действия только основного поля деформации в объеме кристалла GaAs в случае эффекта Бормана.

выхода лучей;

$$W_{2a} = \Lambda |\mathbf{g}| \frac{dU_g}{dx_g} \operatorname{tg} \theta; \quad W_{2b} = \Lambda \mathbf{g} \frac{d\mathbf{U}}{dz}; \quad \gamma_2 = \sqrt{1 + W_2^2}; \quad W_2 = W_{2a} + W_{2b},$$

где Λ — экстинкционная длина, \mathbf{U} — вектор смещения, θ — угол Брэгга.

Зная поле смещений $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ вокруг дислокации [8], по формулам (1) легко рассчитать и построить теоретическое изображение или теоретическую топограмму (ТТ) дислокации.

На рис. 2 приведена теоретическая топограмма (ТТ) одиночной краевой дислокации с осью [001], вектором Бюргерса $\mathbf{b} = [\bar{1}00]$ и плоскостью скольжения (010). Компьютерное моделирование контраста ТТ выполнено с использованием программы, разработанной в Центре физических исследований Новгородского государственного университета А.О. Окуневым. При построении была использована 64-уровневая шкала интенсивности, средний уровень которой соответствовал J_0 . Минимальный контраст на ТТ был принят равным $\delta_{\min} \pm 5\%$.

При построении ТТ на рис. 2 для простоты расчета учитывалось только собственное поле деформаций вокруг дислокации.

Сопоставление рис. 1 и 2 показывает, что профили, знаки контраста и размеры розеток, сформированных собственными полями дефор-

маций, совпадают. Следовательно, дислокации 1, 2, 3 имеют векторы Бюргерса $\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2 = \mathbf{b}_3 = a[\bar{1}00]$ и плоскость скольжения $(0\bar{1}0)$.

Такие дислокации в структуре сфалерита [9] не рассматривались, так как считались энергетически невыгодными и неустойчивыми. Однако ранее такие дислокации были обнаружены в кремнии [10] и была доказана их устойчивость к расщеплению. Таким образом, в структуре сфалерита возможно существование краевых дислокаций не только с малыми векторами Бюргерса $\mathbf{b}_1 = a/2\langle 110 \rangle$ [11], но и с большими векторами Бюргерса $\mathbf{b}_2 = a\langle 100 \rangle$.

Работа выполнена в рамках программы „Научные исследования высшей школы по приоритетным направлениям науки и техники“, подпрограмма 202 „Новые материалы“, раздел 202.01 „Материалы для микро- и нанoeлектроники“. Проект: Разработка методик и идентификации дефектов структуры монокристаллических полупроводников на основе явления аномального прохождения рентгеновских лучей (номер государственной регистрации 01200106001).

Список литературы

- [1] *Borrmann G.* // *Physik Zeit.* 1941. Bd 42. N 9/10. S. 157–162.
- [2] *Данильчук Л.Н., Смородина Т.А.* // *ФТТ.* 1965. Т. 7. № 4. С. 1245–1247.
- [3] *Данильчук Л.Н.* // *ФТТ.* 1969. Т. 11. С. 3085–3091.
- [4] *Данильчук Л.Н.* Бормановская рентгеновская топография дефектов с медленно изменяющимися полями деформаций. Автореф. дис. на соис. учен. степ. докт. физ.-мат. наук. Киев: ИМФ АН Украины, 1992. 43 с.
- [5] *Суворов Э.В., Шульпина И.Л.* // *Поверхность.* 2001. № 7. С. 3–22.
- [6] *Окунев А.О.* Рентгенотопографический анализ дефектов структуры монокристаллического карбида кремния. Автореф. дис. на соис. учен. степ. канд. физ.-мат. наук. В. Новгород: НовГУ, 1999. 21 с.
- [7] *Инденбом В.Л., Чамров В.А.* // *Металлофизика.* 1980. Т. 2. № 3. С. 3–9.
- [8] *Хирт Д., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
- [9] *Хольт Д.Б.* // *Дефекты в кристаллах полупроводников.* М.: Мир, 1969. С. 100–118.
- [10] *Милевский Л.С., Хвостиков В.Д.* // *Рост и несовершенства металлических кристаллов.* Киев. Наук. думка, 1966. С. 261–265.
- [11] *Милевский Л.С.* // *Матер. Всесоюзн. совещания по дефектам структуры в полупроводниках.* Новосибирск: СО АН СССР, 1969. Ч. 1. С. 253–269.