

07

## Влияние слабого магнитного поля на микропластичность кристаллов кремния

© В.А. Макара, Л.П. Стебленко, И.В. Плющай, А.Н. Курилюк, Д.В. Калиниченко, А.Н. Крит, С.Н. Науменко

Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, Киев, Украина

E-mail: kurylyuk\_a@univ.kiev.ua

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 11 февраля 2014 г.)

Теоретически исследуется возможность формирования магнитного упорядочения на оборванных связях в ядре дислокации. Экспериментально показано, что магнитное упорядочение на дислокациях влияет на спин-зависимые эффекты, протекающие в дислокационных кристаллах кремния. Установлено, что предварительная магнитная обработка кристаллов Si в слабом магнитном поле приводит к гашению электропластического эффекта, возникающего в кристаллах кремния при возбуждении их током. Предполагается, что изменение микропластичности при комбинированном воздействии магнитного и электрического тока вызвано ослаблением канала спин-зависимой рекомбинации на дислокационных оборванных связях.

### 1. Введение

Из литературных источников известно, что в кристаллах кремния имеют место явления кооперативного характера, связанные с магнитным упорядочением спинов дислокационных оборванных связей (ДОС) [1–9]. В работе [7] показано, что пластическая деформация кристаллов кремния приводит к уменьшению их диамагнетизма и к появлению зависимости магнитной восприимчивости от напряженности магнитного поля. Первые авторы [7] связывают с появлением в процессе пластической деформации ЭПР-активных парамагнитных *D*-центров и „изолированных“ оборванных связей, второе — с ферромагнитным упорядочением электронных спинов на дислокационных структурах.

Следует отметить, что, несмотря на имеющиеся в литературе доказательства влияния дислокаций на магнитные свойства кремния, перспектива в исследовании магнитных свойств пластически деформированных ковалентных кристаллов далеко не исчерпана.

В связи с отмеченными выше обстоятельствами нам представлялось целесообразным выполнить теоретические расчеты электронных спектров дислокаций, которые выявили бы возможность появления магнитного упорядочения на дислокационных оборванных связях, образованных в процессе микропластической деформации. В то же время мы считали перспективным не только изучение влияния дислокаций на магнитные свойства полупроводниковых кристаллов кремния, но и исследование обратного влияния, а именно влияния магнитного упорядочения ДОС на закономерности движения дислокаций.

Целью настоящей работы является осуществление теоретических расчетов, выявляющих формирование магнитного упорядочения на ДОС в кристаллах кремния, а также проведение экспериментальных исследований в условиях, указывающих на существование

магнитного упорядочения в ядрах дислокаций. Такими условиями, с нашей точки зрения, могут быть условия, связанные с влиянием магнитного поля на электронные свойства дислокаций. При использовании магнитного поля мы ожидали получить опосредованную (косвенную) информацию об электронных процессах, протекающих в кристаллах Si, на дислокациях, в частности информацию о спин-зависимых процессах рекомбинации носителей на ДОС. В наших предыдущих работах [10,11] был выявлен ряд эффектов, объединенных понятием „электропластический эффект“ (ЭПЭ). Электрический эффект возникает в кремнии при его деформировании с одновременным возбуждением электронной подсистемы (в качестве способа возбуждения использовался электрический ток). Суть эффекта состоит в увеличении скорости движения дислокаций под действием тока. Предложенный физический механизм предполагал, что характер и величина ЭПЭ определяются зарядовыми состояниями окружающих дислокации примесных атмосфер, а также обусловленной этими состояниями эффективностью каналов безызлучательной рекомбинации. Нами также было высказано предположение о влиянии состояния спиновых центров в ядрах дислокаций на каналы рекомбинации и в целом на характер ЭПЭ. Поиску доказательств и решению обозначенной научной проблемы и посвящена настоящая работа.

### 2. Методика эксперимента

Исследования проводились на выращенных по методу Чохральского кристаллах кремния *n*-типа, легированных фосфором до удельного сопротивления  $\rho = 4.5 \Omega \cdot \text{см}$ .

Дислокационно-примесное взаимодействие в кристаллах кремния со специально введенными (методом четырехпорного деформирования) изолированными дислокационными полупетлями изучалось не только при

магнитном воздействии, так и при использовании комбинированного влияния магнитного поля и электрического тока. Дислокации вводились в кристаллы Si в процессе деформирования при фиксированных режимах: при температуре  $T = 923$  К, внешнем напряжении  $\sigma = 18$  МПа и времени действия напряжения  $t = 30$  min. Мерой изменения дислокационно-примесного взаимодействия служила величина среднего пробега дислокаций. Для определения величины пробегов дислокаций использовались метод химического селективного травления и металлографический метод. Магнитная обработка (МО) образцов кремния, содержащих дислокации, осуществлялась путем выдержки образцов Si в постоянном магнитном поле с индукцией  $B = 0.17$  Т на протяжении семи суток.

Образцы Si, прошедшие предварительную МО, в последующем использовались для выявления особенностей проявления в них ЭПЭ. При изучении ЭПЭ деформирование магнитообработанных кристаллов кремния осуществлялось одновременно с пропуском через образец Si постоянного электрического тока плотностью  $j = 10^6$  А/м<sup>2</sup>. Используемая при изучении комбинированного влияния МО и электрического тока температура деформирования варьировалась в диапазоне  $T = 823-923$  К.

### 3. Экспериментальные результаты и их обсуждение

Кратко остановимся на полученных в настоящей работе результатах теоретических расчетов атомного строения и электронных спектров краевых дислокаций. Нами было выполнено *ab initio* моделирование сверхъядейки кремния, содержащей диполь из двух краевых дислокаций. Моделирование осуществлялось методом функционала плотности [12] в обобщенном градиентном приближении [13] с помощью пакета программ ABINIT [14]. Числовой отжиг положений атомов проводился по алгоритму, описанному в [15].

Хорошо известно [16], что плоскостью легкого скольжения краевых дислокаций в Si является плоскость (111). В соответствии с этим мы рассматривали краевую дислокацию, вектор Бюргера которой лежит именно в плоскости (111). Для моделирования краевой дислокации мы выбрали сверхъядейку из 192 атомов ( $ax = 4a(111)$ ,  $ay = 2a(1\bar{1}0)$ ,  $az = a(1/21/2\bar{1})$ ). Далее половина атомов (12 атомов) из одной из плоскостей была удалена, в результате чего образовался диполь из двух краевых дислокаций, которые могут двигаться в плоскости скольжения (111). После релаксации атомных позиций такой сверхъядейки в соответствии с силами, рассчитанными из первых принципов, мы получили дополнительную по сравнению с идеальным кристаллом энергию краевой дислокации, составляющую величину 0.12 eV на атом выбранной сверхъядейки.

Анализ рассчитанных энергетических спектров электронных состояний несрелаксированной сверхъядейки

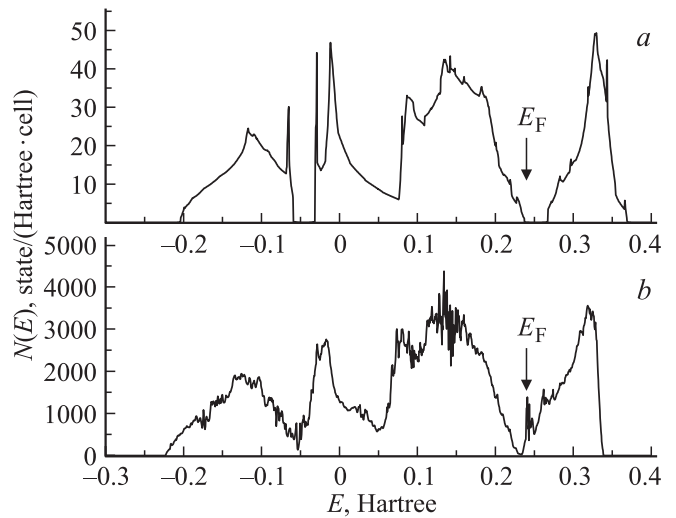


Рис. 1. Энергетическая зависимость плотности электронных состояний  $N(E)$ . *a* — монокристаллический Si, *b* — „срелаксированная“ сверхъядейка, содержащая дислокационный диполь с вектором Бюргера в плоскости (111). Положение уровня Ферми  $E_F$  обозначено стрелкой.

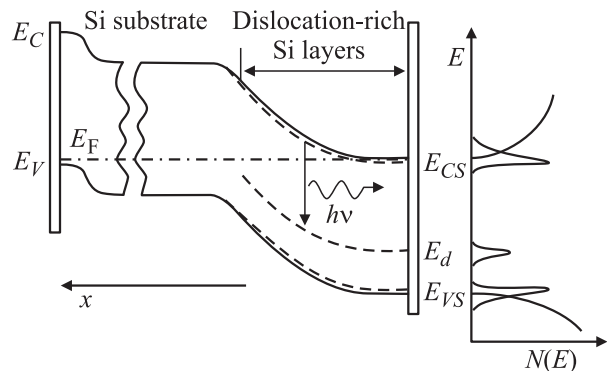


Рис. 2. Схематическая диаграмма зонной структуры и плотности электронных состояний диода, который формируется из кремниевой подложки и дислокационного кремния в области гетероперехода [17]. Слева представлены положения края валентной зоны  $E_V$  и дна зоны проводимости  $E_C$  чистого монокристалла кремния подложки. Справа на зонной схеме представлены дополнительные подзоны  $E_d$  (дислокационная подзона),  $E_{VS}$  и  $E_{CS}$  дислокационного кремния. Положение уровня Ферми  $E_F$  обозначено штрихпунктирной линией.

из 192 атомов показал, что удаление полуплоскости атомов приводит к появлению электронных состояний в области запрещенной зоны, на которые и приходится уровень Ферми (рис. 1). После релаксации сверхъядейки (сначала положений атомов, а затем и размеров сверхъядейки вдоль вектора Бюргера) в электронном спектре вблизи уровня Ферми образуется щель (рис. 1, *b*). Ширина запрещенной зоны дислокационного кремния заметно меньше ширины запрещенной зоны кремния, не содержащего дислокации (рис. 1, *a*). Последнее мы связываем

с наличием поля напряжений и образованием дислокационных подзон над валентной зоной и непосредственно под зоной проводимости. Для сравнения и проведения некоторой аналогии на рис. 2 представлена качественная схема электронных спектров дислокационного кремния, который формируется вблизи гетеропереходов монокристаллический кремний–дислокационный кремний. Эта схема была воспроизведена в [17] по результатам анализа экспериментальных данных по фотолюминесценции, электролюминесценции и вольт-амперных характеристик кремниевых гетероструктур.

Из сравнения рис. 1 и 2 видно, что результаты наших расчетов качественно совпадают со схемой зонной структуры, воспроизведенной в [17] по результатам теоретических оценок и экспериментальных исследований гетероперехода монокристаллический кремний–дислокационный кремний. Уровень Ферми, который в бездислокационном кремнии попадает на верхнюю границу валентной зоны, в дислокационном кремнии лежит в окрестности довольно острой асимметричной подзоны, формирующейся непосредственно под зоной проводимости.

Анализ локальных электронных спектров позволяет связать субпик с оборванными связями на атомах, которые расположены на линии дислокации и атомах, являющихся первыми соседями линии дислокации со стороны удаленной полуплоскости. Упомянутый выше острый пик не наблюдается в локальных спектрах всех других атомов рассмотренной сверхъядчейки. Итак, частично заполненный острый пик, который наблюдается в электронном спектре дислокационного кремния, связан с оборванными ненасыщенными связями, формирующимися в ядре дислокации.

Если проанализировать результаты наших расчетов с точки зрения возможности возникновения зонного магнетизма, то, согласно критерию Стонера, а также в соответствии с зонным механизмом для возникновения магнитного упорядочения необходимо наличие узкого полузаполненного пика вблизи уровня Ферми. Именно таким и является дислокационный субпик (рис. 1), обусловленный оборванными связями в ядре дислокации. Таким образом, согласно нашим *ab initio* расчетам, на краевых дислокациях в кремнии может формироваться ферромагнитное упорядочение по зонному механизму, что согласуется с экспериментальными данными [7–9].

Поскольку кроме теоретических расчетов, касающихся магнитного упорядочения ДОС, целью работы был поиск экспериментальных условий, в которых это упорядочение проявляется, мы полагали, что наиболее пригодными могут быть условия, связанные с протеканием процессов спин-зависимой рекомбинации (СЗР).

Спин-зависимая рекомбинация дает интересную дополнительную информацию об электронных свойствах ДОС в процессе рекомбинации. Небольшое число захваченных на ДОС носителей тока может за счет обменных взаимодействий между ДОС и за счет релаксации решеткой существенно изменять характеристики ДОС.

Исследования СЗР [1–5] показали, что все процессы захвата носителей на ДОС с образованием триплетных и синглетных центров, их транспорта, магнитоупорядочения и рекомбинации являются спин-зависимыми в системах с низкой размерностью. В работе [3] исследована спин-зависимая рекомбинация свободных носителей через ДОС в зависимости от температуры (1.4 и 293 К) и от мощности света в различных магнитных полях (0.04, 3.3, 12.5 vOe). В эксперименте, проводимом в [3], записывалась зависимость сопротивления образца от магнитного поля в области резонансных условий для ЭПР при включенной и выключенной СВЧ-мощности и, таким образом, выделялось влияние СВЧ-поля на проводимость образца. При прохождении через условия парамагнитного резонанса для ДОС в пластически деформированных образцах кремния наблюдалось уменьшение фотопроводимости, что интерпретировалось авторами [3] как увеличение темпа рекомбинации электронов и дырок через ДОС. В работе [5] указывается, что сигнал спин-зависимой рекомбинации наблюдался в кремнии, пластически деформированном при  $T = 1073$  К. Авторы [5] предполагают, что эффект СЗР при столь высокой температуре может быть связан с так называемыми О-центрами и, по-видимому, аналогичен СЗР в аморфном кремнии. Поскольку магнитное поле влияет на электронные процессы в подсистеме носителей [18], а также ввиду того, что дислокационные оборванные связи кремния ответственны за канал спин-зависимой рекомбинации, следовало ожидать, что обработка дислокационных образцов кремния магнитным полем может вызывать изменение спинового состояния центров захвата и, как следствие, влиять на вероятность рекомбинации носителей.

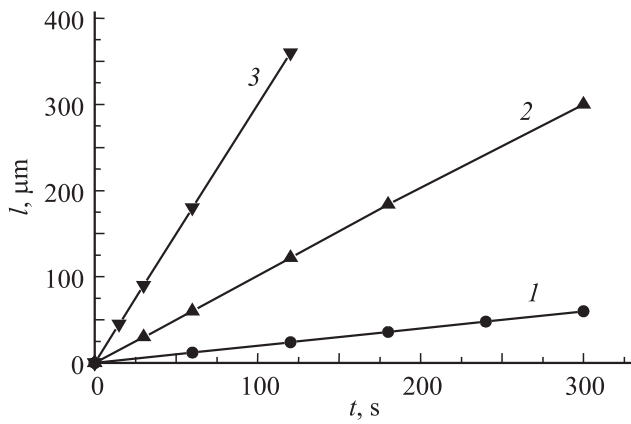
Нами было высказано предположение, что действие магнитного поля может сказываться на характере и величине эффектов, которые наблюдаются в возбужденных электрическим током кристаллах Si [10,11].

С целью проверки этого предположения нами исследовалось влияние предварительной магнитной обработки на ЭПЭ, вызванный пропусканием электрического тока через деформируемые кристаллы кремния.

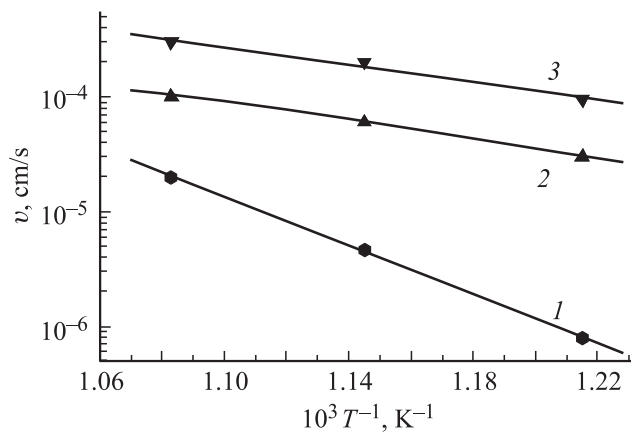
Если под величиной ЭПЭ понимать отношение пробегов и соответственно скорости дислокаций в возбужденных током кристаллах кремния к скорости дислокаций в контрольных (невозбужденных током) кристаллах, то, как видно из рис. 3,4, предварительная магнитная обработка приводит к уменьшению величины ЭПЭ. В [10,11] был предложен механизм ЭПЭ, который учитывал как термоактивированный, так и рекомбинационно-стимулированный вклад в скорость движения дислокаций.

Для анализа возможных механизмов влияния магнитного поля на ЭПЭ учтем предложенную [2] зонную схему дислокационного электронного спектра, объясняющую спин-зависимую рекомбинацию на ДОС.

Простейшим объяснением спин-зависимой рекомбинации, согласно модели, представленной в [2], является



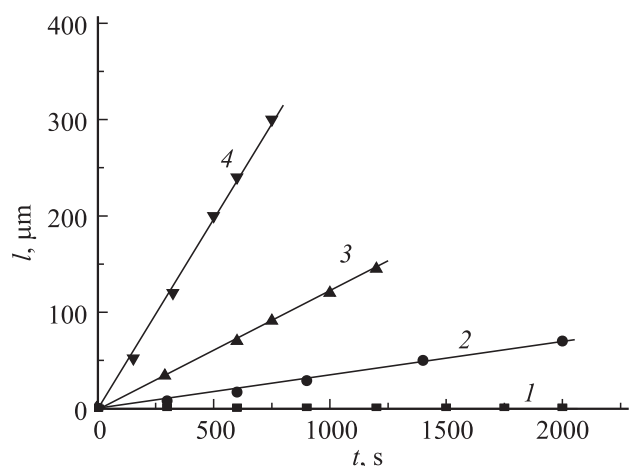
**Рис. 3.** Зависимость средней длины пробега дислокаций  $l$  от времени  $t$  действия механического напряжения  $\sigma = 63.5$  МПа на образцы кремния. Температура деформирования  $T = 923$  К. Образцы кремния: 1 — исходные (деформированные растяжением), 2 — обработанные магнитным полем ( $B = 0.17$  Т) с последующим деформированием растяжением при пропускании электрического тока ( $j = 1 \cdot 10^6$  А/м<sup>2</sup>), 3 — деформированные растяжением с одновременным пропусканием электрического тока.



**Рис. 4.** Температурные зависимости скорости дислокаций  $v$  в кристаллах кремния, деформированных механическим напряжением  $\sigma = 63.5$  МПа. 1–3 — то же, что на рис. 3.

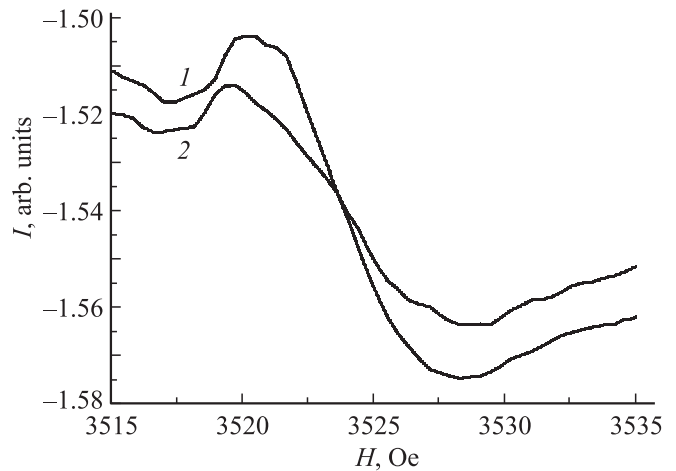
объяснение, заключающееся в том, что приложенное магнитное поле поляризует спины свободных носителей и дислокационных оборванных связей. В соответствии с [2] спин-зависимым является процесс захвата электронов (или дырок) на цепочку ДОС. Поляризация цепочки ДОС относительно направления спина электрона влияет на вероятность его захвата. Авторы работы [2] рассматривают возможность захвата электрона как в синглетное, так и в триплетное состояние. Согласно [2], электрон, захваченный на цепочку ДОС в триплетное состояние, может за счет движения по цепочке привести ее к ферромагнитному упорядочению. Таким образом, обменное взаимодействие между ДОС в соответствии с [2] должно быть ферромагнитным.

Распространение выводов работы [2], а также теоретических расчетов, осуществленных в данной работе, на изложенные выше экспериментальные результаты позволяет нам сделать определенные выводы относительно природы выявленных в нашей работе эффектов. Вполне вероятно, что в наших экспериментах по влиянию магнитного поля на ЭПЭ реализуется действие нескольких механизмов. Прежде всего следует учесть, что магнитное поле вследствие интеркомбинационных переходов влияет на спиновую конфигурацию в комплексах точечных дефектов [19–23]. В нашем случае интеркомбинационные синглет-триплетные переходы вызывают изменение ориентации спина электрона, принимающего участие в химической связи атомов матрицы (Si) с доминирующей в кремнии парамагнитной примесью ( $O_i$ ). Последнее приводит к заполнению антисвязывающих орбиталей и распаду кремний-кислородной связи Si–O. Согласно литературным источникам [19,23], влияние слабого магнитного поля на кристаллы Si проявляется в распаде твердого раствора кислорода, продолжительной генерации кислородсодержащих дефектов, которая завершается формированием кластеров типа  $Si_xO_yV_z$  ( $V$  — вакансия). Учитывая результаты работ [19,23], мы сделали следующее предположение. Структурная релаксация, которая стимулируется магнитным полем, может изменить примесную атмосферу в окрестности дислокации. Это предположение нашло экспериментальное подтверждение в наших исследованиях [24]. В [24] были определены основные свойства выявленного нами на кристаллах кремния магнитоэластического эффекта (МПЭ). Кратко остановимся на этих свойствах. Как видно из рис. 5, магнитная обработка кристаллов кремния приводит к уменьшению до нуля



**Рис. 5.** Зависимость средней длины пробега дислокаций  $l$  от времени  $t$  действия механического напряжения  $\sigma_{st} = 63.5$  (1, 2) и 93.5 МПа (3, 4) на образцы кремния [24]. Температура деформирования  $T = 873$  К. Образцы кремния: 1, 3 — выдержанные в магнитном поле ( $B = 0.17$  Т) с последующей деформацией растяжением; 2, 4 — исходные (деформированные растяжением).

величины перемещений дислокаций и увеличению времени задержки начала их движения (зависимость  $I$  на рис. 5). Увеличение времени задержки начала движения дислокаций после МО свидетельствует об увеличении мощности примесной атмосферы в окрестности дислокаций и указывает на возрастание стартовых напряжений, необходимых для движения дислокаций. Было выявлено, что движение дислокаций в кристаллах Si после МО начиналось при более высоком уровне стартовых напряжений ( $\sigma = 93.5$  МПа), чем в случае контрольных образцов Si (для контрольных образцов Si  $\sigma_{st} = 63.5$  МПа). Однако и при напряжении 93.5 МПа величина пробегов дислокаций оставалась примерно в 2 раза меньшей, чем для контрольных кристаллов. Осуществленный в настоящей работе рентгеноспектральный анализ позволил выяснить вопрос о влиянии магнитного поля на элементный состав примесной атмосферы в окрестности дислокаций. Было установлено, что МО дислокационных образцов Si приводит к существенному изменению в приповерхностных слоях концентрации парамагнитных примесей кислорода и углерода. По нашему мнению, эти примеси геттерируются магнитоактивированной поверхностью и дислокациями из объема. В среднем в окрестности дислокаций в образцах Si, которые прошли МО, концентрация атомов углерода возрастает примерно в 4 раза, а концентрация атомов кислорода — примерно в 6 раз. После МО дислокационных образцов определенные изменения наблюдаются также и в процентном содержании в приповерхностных слоях атомов основного элемента матрицы — кремния. Выявленные изменения в количестве углерода, кислорода и кремния могут быть связаны с усилением диффузионных процессов и протеканием междефектных твердотельных реакций, которые интенсифицируются при магнитном воздействии. Исследование микроструктуры поверхности дислокационных образцов Si, подвергавшихся магнитному воздействию, проводилось также с помощью метода магнитно-силовой микроскопии (МСМ). Эта методика дает возможность выявить и оценить магнитное состояние примесей на поверхности образца. Результаты МСМ-измерений состояния поверхности кристаллов кремния, содержащих дислокации до и после магнитной обработки, указывают на следующее. В результате магнитного влияния поверхность кремния видоизменяется, становится более неоднородной. При этом нарушается планарность поверхности, наблюдается ярко выраженный рельеф, в 2–3 раза возрастает шероховатость поверхности. Как известно, для МСМ-исследований используется двухпроходная методика. При этом суммарный МСМ-кадр представляет собой функцию  $F(x, y)$ , характеризующую распределение магнитного момента по поверхности образца. Наши исследования выявили шестикратное изменение силы магнитного взаимодействия поверхности с кантилевером в процессе сканирования образцов, которые прошли магнитную обработку. Последнее указывает на усиление взаимодействия магнитного зонда с образцом. По нашему мнению, магнитное поле (МП)



**Рис. 6.** ЭПР-спектры деформированных образцов Si. 1 — контрольные образцы, 2 — образцы, которые подвергались воздействию магнитного поля.

стимулирует диффузию магниточувствительных примесей к поверхности и не только изменяет топологию поверхности, но и переводит ее в магниточувствительное состояние. Зафиксированная с помощью рентгеноспектрального анализа, а также с помощью метода МСМ диффузия примесей к поверхности, по нашему мнению, приводит к образованию мощных примесных атмосфер, которые и тормозят движение дислокаций. При исследовании воздействия МП на пластически деформированные кристаллы Si с привлечением метода ЭПР и с помощью специального программного обеспечения нами было зафиксировано уменьшение примерно в 1.5 раза интенсивности ЭПР-сигнала для линии с  $g$ -фактором  $g = 1.999$  (рис. 6). Данная линия соответствует  $p_a$ -парамагнитным центрам (ПЦ);  $P_a$ -центры, которые, согласно [25], соотносятся с вакансионными дефектами, можно отождествлять с немостиковым кислородом. Немостиковый кислород, как известно, представляет собой свободный радикал немостикового атома кислорода, образующийся при разрыве связи Si–O–Si. Установленное уменьшение интенсивности ЭПР-сигнала в результате магнитного воздействия указывает на то, что таких насыщенных кремнием радикалов кислорода становится меньше. Последнее, по нашему мнению, происходит благодаря связыванию кислорода с ДОС. Таким образом, в результате магнитного воздействия уменьшается роль кислорода как изолированного ПЦ, поскольку он участвует в образовании объединенного ПЦ, представляющего собой систему „дислокация + примесная атмосфера“.

Мы предполагаем, что в наших экспериментальных условиях реализуется ситуация, при которой система „дислокация + примесная атмосфера“ (дислокация–стопор) образует синглетную („связывающую“) спиновую конфигурацию, обуславливающую тормозящие свойства стопора. Магнитное поле приводит к поляризации спи-

новых центров в ядре дислокации (ферромагнитному упорядочению ДОС) и спиновой поляризации свободных носителей — электронов. Можно предположить, что вследствие такого упорядочения должны уменьшаться вероятность захвата носителей на ДОС и, соответственно, вероятность рекомбинации носителей на ДОС при пропуске через образцы Si электрического тока. Вероятно, уменьшение эффективности канала рекомбинации носителей должно приводить к уменьшению скорости дислокаций. Наше предположение нашло экспериментальное подтверждение. Как показали наши экспериментальные результаты в кристаллах Si, которые перед возбуждением током испытывали магнитное влияние (зависимости 2 на рис. 3 и 4), наблюдается уменьшение перемещения дислокаций. Поскольку механическое деформирование образцов в наших экспериментах проводилось после завершения магнитной обработки, полученные результаты позволяют говорить о существовании „магнитной памяти“ образцов кремния с дислокациями. В работе было проведено исследование, которое показало, что „магнитная память“ через определенное время (~ 14 суток) после завершения магнитной обработки исчезает. Действительно, при увеличении промежутка времени между завершением магнитной обработки и последующим (после магнитной обработки) деформированием образцов Si до 14 суток МПЭ не проявлялся (пробеги в образцах Si, которые подвергались магнитному воздействию, совпадали с пробегами дислокаций в контрольных образцах Si). С этим экспериментальным фактом хорошо коррелирует характер изменения примесного состояния дислокационных кристаллов Si. Было выявлено, что возросшая после магнитной обработки концентрация примесей кислорода и углерода, которая была зафиксирована с помощью рентгеноспектрального анализа, со временем уменьшалась и приобретала значения, присущие дислокационным кристаллам Si, которые не подвергались магнитному воздействию.

Таким образом, спин-зависимые эффекты и эволюция магниточувствительных комплексов в дислокационных кристаллах кремния, которые были подвергнуты магнитному воздействию, характеризуются обратимостью. Обратимость стимулированной магнитным полем структурной перестройки может быть связана с трансформацией термодинамически неравновесного состояния структуры в равновесное. Результатом такой трансформации может быть отток геттерированных дислокацией примесей кислорода и углерода с приповерхностных слоев в объем. Следствием обратимости процессов структурной релаксации является обнаруженный в работе эффект „магнитной памяти“. Как показали наши эксперименты, высокотемпературный отжиг дислокационных образцов кремния после выдержки в магнитном поле (режим отжига:  $T = 1073$  К,  $t = 15$  min) приводил к ускоренной релаксации приобретенной „магнитной памяти“. После указанного отжига образец Si, подвергавшийся магнитному воздействию, вел себя как исходный. Подобный результат был зафиксирован в работе [7]. Авторами

работы [7] было получено, что после высокотемпературного отжига ( $T = 1073$  К,  $t = 15$  min) образцов Si с дислокациями магнитная восприимчивость пластически деформированных кристаллов соответствует магнитной восприимчивости контрольных образцов. Как показали авторы [7], отжиг кристаллов Si приводит к полному исчезновению сигнала ЭПР  $D$ -центров (ДОС) и связанных с ними донорных и акцепторных уровней в запрещенной зоне. Последнее, вероятно, происходит вследствие реконструкции ядер дислокаций, которая сопровождается попарным замыканием оборванных связей в состоянии  $Si = O$  [7]. Согласно [7], ферромагнитная составляющая пластически деформированных кристаллов Si в результате отжига обращается в нуль. Полученный в наших экспериментальных условиях результат, согласно которому после высокотемпературного отжига дислокационный кристалл Si теряет свойство „магнитной памяти“ и ведет себя как исходный кристалл, может быть объяснен как проявление эффекта обращения в нуль ферромагнитной составляющей, присущей ДОС. В заключительной части работы остановимся на взаимосвязи ЭПЭ с флуктуационными и спиновыми центрами захвата носителей. Как видно из представленных на рис. 3 результатов, в обработанных магнитным полем и возбужденных током кристаллах кремния величина перемещений дислокаций уменьшается по сравнению со случаем кристаллов Si, которые возбуждались током, но не проходили предыдущей магнитной обработки, примерно в 3 раза.

В то же время рассчитанная по зависимостям  $v = f\left(\frac{1}{T}\right)$  (рис. 4) энергия активации движения дислокаций в образцах, которые предварительно подвергались воздействию МП и через которые после магнитной обработки пропускался электрический ток, оказалась практически равной энергии активации  $U \approx 0.75$  eV в образцах, которые подвергались воздействию электрического тока без предварительной МО (в исходных образцах Si рассчитанная энергия активации составляла величину  $U \approx 2.08$  eV). Этот экспериментальный факт можно объяснить, если предположить, что время отрыва перегиба от примеси  $\tau_s^0$  и время спин-решеточной релаксации  $\tau$  ведут себя подобным образом: они быстро уменьшаются при увеличении температуры. В предположении, что характер зависимостей  $\tau_s^0(T)$  и  $\tau(T)$  приблизительно одинаков, можно заключить, что наблюдавшиеся в данной работе эффекты, вероятнее всего, связаны с изменением предэкспоненциального множителя  $v_{0i}$  в эмпирической формуле для скорости дислокаций  $v$ , полученной авторами [26] для возбужденных электронным пучком кристаллов кремния:

$$v = v_{0T} \exp\left[-\frac{E}{kT}\right] + v_{0i} \exp\left[-\frac{E - \Delta E}{kT}\right], \quad (1)$$

где параметр  $v_{0T}$  — предэкспонента в выражении для скорости движения дислокаций  $v$  в кристаллах кремния, которые не подвергались воздействию электрическим током, параметр  $v_{0i}$  — предэкспонента в выражении для



скорости движения дислокаций  $v$  в кристаллах кремния, которые подвергались воздействию электрическим током,  $E$  — энергия термоактивации движения дислокаций для данного механического напряжения  $\sigma$ ;  $\Delta E$  — уменьшение активационной энергии за счет безызлучательной рекомбинации в возбужденных током образцах Si. Предэкспонента  $v_{0T}$  содержит частоту колебаний образующегося на дислокации и обеспечивающего движение дислокации двойного перегиба. Указанная частота практически равна дебаевской частоте  $\vartheta_D$ . Предэкспонента  $v_{0i}$  содержит частоту рекомбинации  $\vartheta_R$ , умноженную на величину квантового выхода  $\eta^*$ , вместо колебательной частоты.

Рекомбинационная частота  $\vartheta_R$  (темп безызлучательного захвата носителей на двойные перегибы) определяется скоростью образования носителей, временами их жизни и сечением захвата перегиба. Согласно [26], отношение предэкспонент записывается в виде

$$v_{0T}/V_{0i} = \vartheta_D/\eta^* \vartheta_R. \quad (2)$$

Оценка предэкспоненциального множителя показала, что в кристаллах кремния, которые подвергались воздействию МП и через которые впоследствии пропускался электрический ток, величина  $v_{0i} = 9.4 \cdot 10^{-16}$  м/с. В кристаллах, через которые пропускался ток без предварительной МО, предэкспоненциальный множитель оказался равным  $v_{0i} = 6.9 \cdot 10^{-15}$  м/с. В соответствии с формулами (1) и (2) можно предположить, что в кристаллах Si, которые перед пропуском тока прошли предварительную магнитную обработку, изменяется параметр, связанный с рекомбинационной частотой.

Анализ полученных результатов позволяет предположить, что наряду с чисто флуктуационными центрами захвата в кремнии существуют также спиновые центры захвата, которые проявляются при магнитном влиянии. Изменение состояния спиновых центров захвата и спинового состояния носителей после пребывания образцов кремния в магнитном поле приводит к изменению величины ЭПЭ.

Таким образом, в настоящей работе установлено, что стимулированные магнитным полем спин-зависимые процессы, протекающие в подсистеме парамагнитных структурных дефектов и ферромагнитно-упорядоченных ДОС, а также в подсистеме носителей, оказывают заметное влияние на микропластические свойства кремния, а кинетика этих процессов может эффективно регулироваться слабым постоянным МП. Показано, что подвижность дислокаций может быть использована в качестве индикатора спин-зависимых эффектов, а следовательно, индикатора связи между пластическими свойствами кристаллов и электронным состоянием дефектов.

Нами было выявлено, что ЭПЭ после МО уменьшается приблизительно в 3 раза независимо от плотности тока, которым возбуждали образцы кремния. Таким образом, после пребывания образцов Si в МП наблюдается определенный уровень „насыщения“ ЭПЭ

по плотности тока. В то же время в возбужденных кристаллах кремния, которые не обрабатывались предварительно магнитным полем, наблюдалась зависимость ЭПЭ от плотности тока. Последнее позволяет высказать предположение, что спин-зависимые эффекты в условиях нашего эксперимента проявляют определенную особенность. Эта особенность состоит в том, что спин-зависимая рекомбинация носителей на ДОС практически не зависит от плотности тока и определяется лишь проекцией суммарного спина цепочки ДОС на направление спина электрона. Между тем логично предположить, что „насыщение“ ЭПЭ при магнитных влияниях (отсутствие зависимости ЭПЭ от плотности тока) определяется термоактивированным преодолением магниточувствительных локальных стопоров.

Экспериментальные результаты, полученные в настоящей работе, свидетельствуют о том, что в результате МО происходит ослабление канала рекомбинации носителей. Это ослабление может быть связано не только с процессом СЗР, который детально освещался выше, но и с энергетической перестройкой в результате МО центров захвата. Основанием для высказывания такой гипотезы послужила также информация о характере перестройки примесно-дефектной структуры кремния после обработки импульсным магнитным полем, полученная методом малоуглового рассеяния света в ИК области спектра [19]. Экспериментальные результаты, представленные в [19], свидетельствуют о перестройке в результате МО глубоких центров в мелкие, а следовательно, подтверждают высказанное нами предположение об изменении состояния центров рекомбинации при воздействии МП. В результате подобного изменения происходит ослабление рекомбинационных процессов и увеличение времени жизни неосновных носителей заряда, поскольку мелкие центры не выступают эффективными центрами рекомбинации. Последнее приводит к уменьшению электропластического эффекта, а следовательно, к изменению микропластических свойств приповерхностных слоев, что и наблюдалось нами экспериментально.

#### 4. Заключение

Исследование влияния магнитного поля на микропластичность, проведенное в настоящей работе, является актуальным для современной физики полупроводников, поскольку приближает нас к установлению физических механизмов, определяющих свойства пластичности и прочности полупроводниковых кристаллов. Кроме того, полученные в работе результаты дают основание предположить, что в качестве внешних факторов, которые влияют на скорость безызлучательной дезактивации энергии электронного возбуждения кристаллов кремния, может быть использовано магнитное поле. Влияние МП на скорость безызлучательных потерь в коллективе оборванных химических связей дислокаций позволяет

считать полученные результаты практически значимыми. Поскольку концентрация быстрых поверхностных состояний играет определенную роль в функционировании элементов интегральных схем, проведенная поисковая работа по уменьшению этой величины является актуальной.

## Список литературы

- [1] В.В. Кведер, Ю.А. Осипьян. ЖЭТФ **80**, 3, 1206 (1981).
- [2] Ю.А. Осипьян, В.В. Кведер, А.И. Шальнин. ЖЭТФ **83**, 2, 699 (1982).
- [3] В.В. Кведер, Ю.А. Осипьян. Изв. АН СССР. Сер. физ. **51**, 4, 626 (1987).
- [4] М. Суезава, К. Сумино. Изв. АН СССР. Сер. физ. **51**, 7, 633 (1987).
- [5] М.Н. Золотухин, В.В. Кведер, Ю.А. Осипьян. ЖЭТФ **81**, 1, 299 (1981).
- [6] В.И. Бойчук, В.М. Цмоць, Б.В. Янишин. УФЖ **33**, 10, 1515 (1988).
- [7] В.М. Цмоць, В.С. Янишевский, Я.Л. Заяц, В.С. Штым. Препринт ИФКС-93-11Г. Львов (1993). 33 с.
- [8] Н.Н. Новиков, В.М. Цмоць, З.Ф. Ивасив, Я.Л. Заяц, В.С. Штым. УФЖ **41**, 11, 1127 (1996).
- [9] V.M. Tsmots, P.G. Litovchenko, Yu.V. Pavlovskyy, M.M. Luchkevych. Ukr. J. Phys. **54**, 10, 1007 (2009).
- [10] В.В. Лемешко, В.А. Макара, В.В. Обуховский, Л.П. Стебленко, Е.Г. Робур. ФТТ **36**, 9, 2618 (1994).
- [11] В.А. Макара, Л.П. Стебленко, Н.Я. Горидько, Е.Г. Робур, Т.В. Волкова. УФЖ **42**, 3, 328 (1997).
- [12] X. Gonze, V. Amadond, P.-M. Anglade, J.-M. Beukena, F. Bottind, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Côté, T. Deutsch, L. Genovesi, Ph. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D.R. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, M. Mancini, S. Mazevet, M.J.T. Oliveira, G. Onida, Y. Pouillon, T. Rangel, G.-M. Rignanese, D. Sangalli, R. Shaltaf, M. Torrent, M.J. Verstraete, G. Zerah, J.W. Zwanziger. Computer Phys. Commun. **180**, 2582 (2009).
- [13] J. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett., **77**, 3865 (1996).
- [14] <http://www.abinit.org/>
- [15] H.V. Schlegel. J. Comput. Chem. **3**, 2, 214 (1982).
- [16] Т. Судзуки, Х. Есианага, С. Такеути. Динамика дислокаций и пластичность. Мир, М. (1989). 296 с.
- [17] A.A. Shklyayev, F.N. Dultsev, K.P. Mogilnikov, A.V. Latyshev, M. Ichikawa. J. Phys. D **44**, 2, 025402 (2011).
- [18] В.П. Лебедев, В.С. Крыловский. ФТТ **27**, 5, 1285 (1985).
- [19] В.Н. Бузыкин, О.И. Дацко, С.Н. Постников. Электрон. обраб. материалов **2**, 16 (1993).
- [20] М.И. Молоцкий. ФТТ **35**, 11 (1993).
- [21] А.Л. Бучаченко. ЖЭТФ **132** 4, 827 (2007).
- [22] М.И. Молоцкий. ФТТ **33** 10, 3112 (1991).
- [23] М.Н. Левин, Б.А. Зон. ЖЭТФ **111**, 4, 1373 (1997).
- [24] В.А. Макара, Л.П. Стебленко, Н.Я. Горидько, В.Н. Кравченко, А.Н. Коломиец. Вест. Киев. ун-та. Сер.: Физ.-мат. науки **4**, 316 (1999).
- [25] А.Б. Ройцин, В.М. Маевский. УФН **159**, 2, 297 (1998).
- [26] Н. Маеда, К. Кимура, С. Такеути. Изв. АН СССР. Сер. физ. **51**, 4, 729 (1987).