

Упругие поля винтовой супердислокации с полым ядром (трубки), перпендикулярной свободной поверхности кристалла

© А.Г. Шейнерман, М.Ю. Гуткин

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: gutkin@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 12 февраля 2003 г.

В окончательной редакции 21 февраля 2003 г.)

Рассмотрены винтовые супердислокации с полыми ядрами (трубки), формирующиеся в процессе роста полупроводниковых кристаллов типа карбида кремния и нитрида галлия. Впервые получены точные аналитические выражения для полей перемещений, деформаций и напряжений трубки, перпендикулярной плоской свободной поверхности упругоизотропного полупространства. Показано, что строгий учет граничных условий на цилиндрической свободной поверхности трубки существенно влияет на поле напряжений содержащейся в ней дислокации. Область сильного влияния расположена вокруг трубки на расстоянии порядка ее радиуса. В этой области упругие деформации могут достигать величин порядка долей процента. Полученные результаты могут быть использованы при анализе взаимодействий трубок между собой и с другими дефектами, а также для моделирования их поведения в процессе роста кристалла.

Работа выполнена при поддержке программы „Физика твердотельных наноструктур“ Минпрома России и программы „Интеграция“ (грант Б0026).

О формировании винтовых супердислокаций с полыми ядрами в процессе роста некоторых кристаллов известно уже более 50 лет [1]. Они были обнаружены в кристаллах карбида кремния, одного из наиболее перспективных сегодня полупроводниковых материалов силовой электроники. Здесь супердислокации наблюдаются в виде почти прямолинейных цилиндрических полостей (микротрубок) диаметром до десятков микрометров, вытянутых в направлении роста кристалла и проходящих через него насквозь. Их плотность в современных промышленных кристаллах составляет от 10 до 100 см^{-2} в зависимости от размера и качества (стоимости) образца [2]. В середине 90-х годов прошлого века появились первые сведения о винтовых дислокациях с полыми ядрами (нанотрубках) в нитриде галлия [3,4], который в последние годы привлекает огромное внимание как широкозонный полупроводниковый материал с уникальными перспективами использования в оптоэлектронике. Здесь диаметр таких нанотрубок меняется в пределах от 3.5 до 50 nm, а их плотность достигает $10^5 - 10^7 \text{ см}^{-2}$ [3–5]. Несмотря на существенную разницу в размерах и плотностях микро- и нанотрубок их общая геометрия и дислокационная природа дают возможность анализировать эти объекты с единых позиций. Далее будем называть их „трубками“ (pipes), подразумевая при этом, что они содержат винтовые (супер)дислокации.

К настоящему моменту имеется большое количество свидетельств о негативном воздействии трубок на рабочие характеристики приборов, построенных на кристаллах карбида кремния [2,6–9]. Урон может оказаться настолько существенным, что трубки даже называют „дефектами-убийцами“ приборов [2,10], а их плотность входит в число основных показателей качества выращенных кристаллов. Вопрос о влиянии трубок на свойства

приборных структур на основе нитрида галлия также активно изучается [11–14]. Отсюда понятно то внимание, которое уделяется экспериментальным исследованиям трубок [3–11,13–30].

Первая теоретическая модель формирования трубок была предложена Франком [31]. Он заметил, что полые ядра дислокаций с большими векторами Бюргера исключают области высоких упругих напряжений вокруг дислокационных линий и тем самым уменьшают энергию этих дефектов. Таким образом, образование трубок в кристаллах требует наличия супердислокаций. Хотя теоретически трубки могут содержать как винтовые, так и краевые или смешанные дислокации, в большинстве случаев наблюдаются трубки, содержащие лишь винтовую компоненту. В дальнейшем будем рассматривать только более распространенные трубки, содержащие винтовые дислокации. Местами образования супердислокаций, приводящих к появлению микротрубок, могут служить примеси [17–19], включения второй фазы [21,22], полости [5,21,26] или поверхностные ступеньки [21,27]. Кроме того, трубки часто бывают связаны с малоугловыми границами зерен [19,29], образующимися преимущественно в местах сопряжения различных политипов (областей с различными типами кристаллической решетки) [8].

Поскольку трубки содержат (супер)дислокации, создающие в кристалле далекодействующие упругие напряжения, эволюция трубок (их движение [15,29], расщепление [7,24,25,28,39] или объединение [29]) в процессе роста кристалла и последующего отжига во многом определяется упругим взаимодействием самих этих дислокаций между собой и с другими дефектами или напряженными областями кристалла. Например, расщепление или объединение трубок (которое соответственно

может сопровождаться их зарастанием [7,24,25,29] или образованием макрополостей [29]) является следствием расщепления или объединения содержащихся в них дислокаций. Таким образом, существует множество процессов, где взаимодействие трубок между собой и с другими дефектами может играть важную роль.

В предшествующих теоретических работах, посвященных исследованию взаимодействия трубок с винтовыми дислокациями [32,33] и между собой [33], а также анализу условий расщепления трубок [30], рассматривались трубки в бесконечной среде. Между тем движение трубок, а также процессы их слияния и расщепления осуществляются преимущественно на фронте роста кристалла. Поэтому свободная поверхность растущего кристалла должна оказывать определяющее влияние на эволюцию ансамбля трубок. Цель настоящей работы — теоретическое исследование „упругой составляющей“ такого влияния, т.е. определение экранирующего воздействия свободной поверхности кристалла и собственной свободной поверхности трубки на упругие поля содержащейся в ней дислокации. Такая постановка задачи предполагает получение точного решения граничной задачи теории упругости для трубки, перпендикулярной свободной поверхности кристалла. Полученные в результате поля упругих перемещений и напряжений трубок с винтовыми дислокациями могут быть в дальнейшем использованы, в частности, для расчета энергий и сил взаимодействия в ансамблях трубок, для анализа условий их слияния или расщепления.

1. Поле напряжений

Рассмотрим упругоизотропное полупространство $z \geq 0$ с цилиндрической полостью радиуса R_0 , содержащей винтовую дислокацию с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_z$ (рис. 1). В цилиндрической системе координат (r, φ, z) с началом на оси цилиндрической полости напряжения σ_{ij} , создаваемые дислокацией, должны удовлетворять граничным условиям $\sigma_{iz}|_{z=0} = 0$ и $\sigma_{ir}|_{r=R_0} = 0$, где $i = r, \varphi, z$. Решение такой граничной

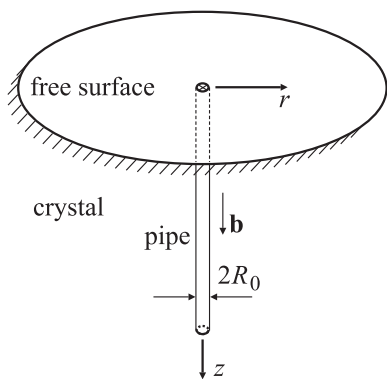


Рис. 1. Трубка, содержащая винтовую (супер)дислокацию, перпендикулярная плоской свободной поверхности кристалла.

задачи будем искать с помощью метода виртуальных поверхностных дефектов [34]. Следуя в русле общего подхода [34], представим поле напряжений σ_{ij} в виде

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^d + \sigma_{ij}^v, \tag{1}$$

где σ_{ij}^d — поле напряжений, которое винтовая дислокация создавала бы в отсутствие полости, а σ_{ij}^v — дополнительное поле напряжений, необходимое для удовлетворения граничных условий на поверхности полости $r = R_0$.

Поле напряжений σ_{ij}^d рассчитывается по формулам [34,35]

$$\sigma_{r\varphi}^d = -\frac{Gb}{2\pi R_0} \frac{\tilde{r}^2}{\tilde{R}(\tilde{R} + \tilde{z})^2}, \tag{2}$$

$$\sigma_{z\varphi}^d = \frac{Gb}{2\pi R_0} \frac{\tilde{z}}{\tilde{r}\tilde{R}}, \tag{3}$$

$$\sigma_{rr}^d = \sigma_{\varphi\varphi}^d = \sigma_{zz}^d = \sigma_{zr}^d = 0, \tag{4}$$

где $\tilde{r} = r/R_0$, $\tilde{z} = z/R_0$, $\tilde{R} = \sqrt{\tilde{r}^2 + \tilde{z}^2}$, а G — модуль сдвига. Поле напряжений σ_{ij}^d удовлетворяет граничным условиям $\sigma_{iz} = 0$ ($i = r, \varphi, z$) на поверхности $z = 0$.

Поле напряжений σ_{ij}^v можно выразить через поля напряжений $\sigma_{ij}^l(\tilde{r}, \tilde{z}, \tilde{z}')$ виртуальных дисклинационных петель кручения в полупространстве $z \geq 0$. Пусть эти петли имеют форму окружностей радиуса R_0 , их центры расположены на оси z , а плоскости параллельны плоской свободной поверхности $z = 0$. Пусть также эти виртуальные петли непрерывно распределены по поверхности цилиндра, а их положения обозначены как z' . Тогда суммарное поле напряжений петель имеет вид

$$\sigma_{ij}^v(\tilde{r}, \tilde{z}) = \int_0^\infty \rho(\tilde{z}') \sigma_{ij}^l(\tilde{r}, \tilde{z}, \tilde{z}') d\tilde{z}', \quad \tilde{z} \geq 0, \quad \tilde{r} > 1, \tag{5}$$

где $\rho(\tilde{z}')$ — плотность распределения виртуальных дисклинационных петель. Выражение для поля напряжений σ_{ij}^l отдельной петли в полупространстве представим в виде [36]

$$\sigma_{ij}^l(\tilde{r}, \tilde{z}, \tilde{z}') = \sigma_{ij}^\infty(\tilde{r}, \tilde{z} - \tilde{z}') - \sigma_{ij}^\infty(\tilde{r}, \tilde{z} + \tilde{z}'), \tag{6}$$

где $\sigma_{ij}^\infty(\tilde{r}, \tilde{z} - \tilde{z}')$ — поле напряжений дисклинационной петли кручения с линией ($\tilde{r} = 1, \tilde{z} = \tilde{z}'$), расположенной в бесконечной среде.

В любой точке вне линии петли поле напряжений $\sigma_{ij}^\infty(\tilde{r}, \tilde{z})$ определяется соотношениями [36]

$$\sigma_{r\varphi}^\infty = -\frac{G\omega}{2} \text{sign } \tilde{z} J(2, 2; 1), \tag{7}$$

$$\sigma_{z\varphi}^\infty = -\frac{G\omega}{2} J(2, 1; 1), \tag{8}$$

$$\sigma_{rr}^\infty = \sigma_{\varphi\varphi}^\infty = \sigma_{zz}^\infty = \sigma_{rz}^\infty = 0, \tag{9}$$

где ω — мощность (величина вектора Франка) дисклинационной петли, $J(m, n; p)$ обозначает интеграл

Лифшица–Ханкеля, определяемый выражением [37,38]

$$J(m, n; p) = \int_0^{\infty} J_m(\kappa) J_n(\kappa \tilde{r}) e^{-\kappa|\tilde{z}|} \kappa^p d\kappa.$$
 Здесь $J_l(t)$ — функция Бесселя первого рода.

Подстановка суммарного поля виртуальных петель (5) с учетом (6)–(9) в граничное условие на поверхности цилиндрической полости $\sigma_{r\varphi}^v(\tilde{r} = 1, \tilde{z}) = -\sigma_{r\varphi}^d(\tilde{r} = 1, \tilde{z})$ (где $\sigma_{ij}^v(\tilde{r} = 1, \tilde{z}) = \lim_{\tilde{r} \rightarrow 1} \sigma_{ij}^v(\tilde{r}, \tilde{z})$) дает интегральное

уравнение относительно плотности этих петель $\rho(\tilde{z}')$. Чтобы решить это уравнение, продолжим функцию $\rho(\tilde{z}')$ (первоначально определенную для $z \geq 0$) в область $z < 0$ с помощью соотношения $\rho(-\tilde{z}') = -\rho(\tilde{z}')$. Тогда с учетом уравнения (6) формулу (5) можно представить в виде

$$\sigma_{ij}^v(\tilde{r}, \tilde{z}) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\tilde{z}') \sigma_{ij}^{\infty}(\tilde{r}, \tilde{z} - \tilde{z}') d\tilde{z}', \quad (10)$$

и граничное условие $\sigma_{r\varphi}^v(\tilde{r} = 1, \tilde{z}) = -\sigma_{r\varphi}^d(\tilde{r} = 1, \tilde{z})$ приводит к интегральному уравнению типа Коши

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\tilde{z}') \sigma_{r\varphi}^{\infty}(\tilde{r} = 1, \tilde{z} - \tilde{z}') d\tilde{z}' = -\sigma_{r\varphi}^d(\tilde{r} = 1, \tilde{z}). \quad (11)$$

Применяя преобразование Фурье $\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tilde{z}) e^{-ik\tilde{z}} d\tilde{z}$ к уравнению (11), получаем

$$\hat{\rho}(k) \hat{\sigma}_{r\varphi}^{\infty}(\tilde{r} = 1, k) = -\hat{\sigma}_{r\varphi}^d(\tilde{r} = 1, k). \quad (12)$$

Поскольку $\rho(\tilde{z})$ и $\sigma_{r\varphi}^{\infty}(\tilde{r} = 1, \tilde{z})$ — нечетные функции \tilde{z} , то и $\hat{\rho}(k)$ и $\hat{\sigma}_{r\varphi}^{\infty}(\tilde{r} = 1, k)$ — также нечетные функции k . Следовательно, $\hat{\sigma}_{r\varphi}^d(\tilde{r} = 1, k)$ — четная функция k , и $\sigma_{r\varphi}^d(\tilde{r} = 1, \tilde{z})$ тоже должна быть четной функцией \tilde{z} . Поэтому определим $\sigma_{r\varphi}^d$ в области $z < 0$ соотношением $\sigma_{r\varphi}^d(\tilde{r} = 1, \tilde{z}) = \sigma_{r\varphi}^d(\tilde{r} = 1, -\tilde{z})$.

Подставляя формулы (2) и (7) в (12) и взяв соответствующие интегралы, находим Фурье-образ функции распределения виртуальных дисклинационных петель по поверхности полости

$$\hat{\rho}(k) = \frac{b}{i\pi\omega R_0} \frac{-K_2(|k|) + 2/k^2}{kI_2(|k|)K_2(|k|)}, \quad (13)$$

где i — мнимая единица, а $I_2(|k|)$ и $K_2(|k|)$ — модифицированные функции Бесселя второго рода и второго порядка.

Для расчета σ_{ij}^v применим преобразование Фурье к уравнению (10). При этом получаем

$$\hat{\sigma}_{ij}^v(\tilde{r}, k) = \hat{\rho}(k) \hat{\sigma}_{ij}^{\infty}(\tilde{r}, k). \quad (14)$$

Поскольку $\sigma_{r\varphi}^{\infty}(\tilde{r}, \tilde{z})$ — нечетная функция \tilde{z} , то $\hat{\sigma}_{r\varphi}^{\infty}(\tilde{r}, k)$ — нечетная функция k , следовательно, $\hat{\sigma}_{r\varphi}^v(\tilde{r}, k)$ — четная функция k . Аналогичным образом, поскольку $\sigma_{z\varphi}^{\infty}(\tilde{r}, \tilde{z})$ — четная функция \tilde{z} , то $\hat{\sigma}_{z\varphi}^v(\tilde{r}, k)$ —

нечетная функция k . Напряжения σ_{ij}^v получаются из (14) с помощью обратного преобразования Фурье

$$\sigma_{ij}^v(\tilde{r}, \tilde{z}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\rho}(k) \hat{\sigma}_{ij}^{\infty}(\tilde{r}, k) e^{ik\tilde{z}} dk. \quad (15)$$

Подстановка (7)–(9) и (13) в (15) и аналитическое интегрирование получившихся выражений дает

$$\sigma_{r\varphi}^v = \frac{Gb}{\pi^2 R_0} \int_0^{\infty} \frac{[-K_2(k) + 2/k^2] K_2(\tilde{r}k)}{K_2(k)} \cos k\tilde{z} dk, \quad (16)$$

$$\sigma_{z\varphi}^v = \frac{2Gb}{\pi^2 R_0} \left[-\frac{\pi}{4} \frac{\tilde{z}}{\tilde{r}\sqrt{\tilde{r}^2 + \tilde{z}^2}} + \int_0^{\infty} \frac{K_1(\tilde{r}k)}{k^2 K_2(k)} \sin k\tilde{z} dk \right], \quad (17)$$

$$\sigma_{rr}^v = \sigma_{\varphi\varphi}^v = \sigma_{zz}^v = \sigma_{rz}^v = 0, \quad \tilde{z} \geq 0, \quad \tilde{r} > 1. \quad (18)$$

При выводе формулы (17) использовано условие $\int_0^{\infty} J_2(\kappa) J_1(\kappa \tilde{r}) d\kappa = 0$ при $\tilde{r} > 1$. Учет этого равенства позволил получить выражения для σ_{ij}^v (определяемые формулами (16)–(18)), непрерывные в точке $\tilde{r} = 1$: $\lim_{\tilde{r} \rightarrow 1} \sigma_{ij}^v(\tilde{r}, \tilde{z}) = \sigma_{ij}^v(1, \tilde{z})$.

Теперь поле напряжений σ_{ij} трубки, перпендикулярной свободной поверхности $z = 0$, равно сумме полей напряжений σ_{ij}^d , определяемых по формулам (2)–(4), и σ_{ij}^v , рассчитываемых с помощью (16)–(18). Используя соотношение

$$\frac{\pi}{2} \frac{\tilde{r}^2}{R(\tilde{R} + \tilde{z})^2} = \int_0^{\infty} \left[-K_2(\tilde{r}k) + \frac{2}{(\tilde{r}k)^2} \right] \cos k\tilde{z} dk, \quad (19)$$

можно представить искомое поле напряжений трубки σ_{ij} в следующем компактном виде:

$$\sigma_{r\varphi} = \frac{2Gb}{\pi^2 R_0} \int_0^{\infty} \left(\frac{K_2(\tilde{r}k)}{K_2(k)} - \frac{1}{\tilde{r}^2} \right) \frac{\cos k\tilde{z}}{k^2} dk, \quad (20)$$

$$\sigma_{z\varphi} = \frac{2Gb}{\pi^2 R_0} \int_0^{\infty} \frac{K_1(\tilde{r}k)}{k^2 K_2(k)} \sin k\tilde{z} dk, \quad (21)$$

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{zz} = \sigma_{rz} = 0. \quad (22)$$

Легко убедиться, что это решение сразу удовлетворяет граничным условиям на плоской свободной поверхности кристалла $\sigma_{z\varphi}|_{\tilde{z}=0} = 0$ и на цилиндрической свободной поверхности трубки $\sigma_{r\varphi}|_{\tilde{r}=1} = 0$.

Полученные выражения (20)–(22) очень удобны для численного анализа распределения упругих напряжений и деформаций (очевидно, $\varepsilon_{i\varphi} = \sigma_{i\varphi}/(2G)$) вокруг трубки у поверхности кристалла. Зависимости $\sigma_{z\varphi}(\tilde{z})$, $\sigma_{z\varphi}(\tilde{r})$ и $\sigma_{r\varphi}(\tilde{r})$ показаны на рис. 2 сплошными линиями (значения напряжений даны в единицах $Gb/(2\pi R_0)$).

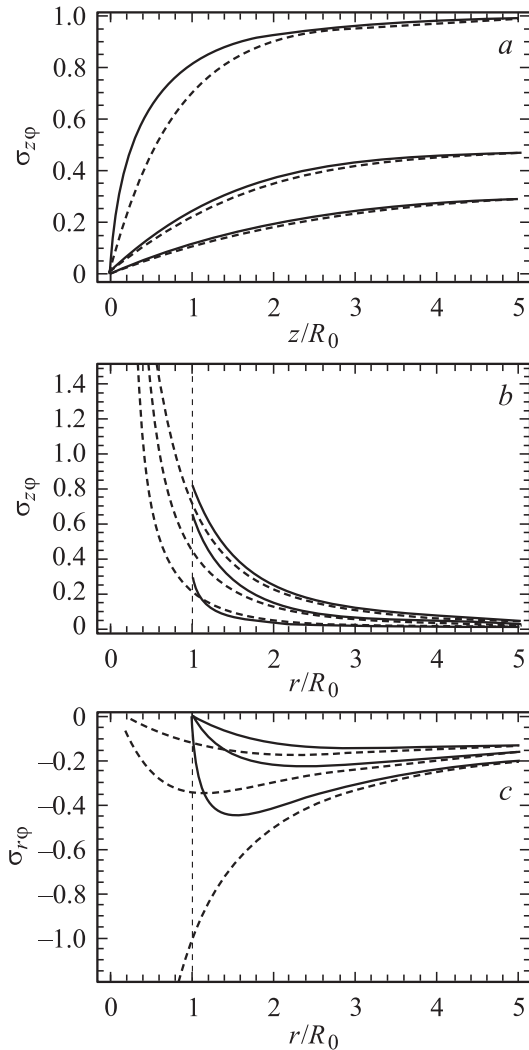


Рис. 2. Напряжения $\sigma_{z\varphi}$ и $\sigma_{r\varphi}$ (сплошные линии), $\sigma_{z\varphi}^d$ и $\sigma_{r\varphi}^d$ (штриховые линии), создаваемые соответственно трубками и винтовыми дислокациями со сплошным ядром, перпендикулярными свободной поверхности; (a) $\sigma_{z\varphi}(z/R_0)$ и $\sigma_{z\varphi}^d(z/R_0)$ для $r/R_0 = 1, 2, 3$ (сверху вниз); (b) $\sigma_{z\varphi}(r/R_0)$ и $\sigma_{z\varphi}^d(r/R_0)$ для $z/R_0 = 0.2, 0.5, 1$ (сверху вниз); (c) $\sigma_{r\varphi}(r/R_0)$ и $\sigma_{r\varphi}^d(r/R_0)$ для $z/R_0 = 0.2, 0.5, 1$ (снизу вверх). Значения напряжений даны в единицах $Gb/(2\pi R_0)$.

Штриховые линии показывают соответствующие напряжения $\sigma_{z\varphi}^d$ и $\sigma_{r\varphi}^d$, создаваемые винтовой дислокацией со сплошным ядром. Как следует из рис. 2, вблизи свободной поверхности трубки ($\tilde{r} = 1$) обе ненулевые компоненты ее поля напряжений (20) и (21) существенно отличаются от соответствующих компонент поля напряжений (2) и (4) от дислокации со сплошным ядром. Напротив, на расстоянии от линии дислокации ($\tilde{r} = 0$), превышающем $2R_0$, два решения приближаются друг к другу. В этой области вместо выражений для поля напряжений трубки (20)–(22) можно использовать более простое решение (2)–(4) для поля напряжений винтовой дислокации со сплошным ядром.

Оценим уровень упругих деформаций вблизи типичной трубки у свободной поверхности кристалла. Возьмем для примера хорошо изученный случай кристалла 6H-SiC, для которого установлено выполнение соотношения Франка [31] $R_0 = Gb^2/(8\pi^2\gamma)$, где γ — плотность энергии свободной поверхности трубки. С учетом этого соотношения упругие деформации можно представить в виде $\varepsilon_{i\varphi}(\tilde{r}, \tilde{z}) = \sigma_{i\varphi}(\tilde{r}, \tilde{z})/(2G) = 2\pi\gamma/(Gb)\Phi_{i\varphi}(\tilde{r}, \tilde{z})$, где функциями $\Phi_{i\varphi}(\tilde{r}, \tilde{z})$ обозначены интегралы в выражениях (20) и (21), домноженные на $4/\pi$ (именно функции $\Phi_{i\varphi}(\tilde{r}, \tilde{z})$ построены на рис. 2). Для отношения γ/G в случае кристалла 6H-SiC известны оценки $(1.1-1.6) \cdot 10^{-3} \text{ nm}$, полученные из анализа экспериментальных данных [39]. Величину вектора Бюргера возьмем в диапазоне от $2c$ до $7c$ [39], где c — постоянная решетки в направлении роста кристалла [0001], $c \approx 1.5 \text{ nm}$ [32]. Тогда постоянный множитель перед $\Phi_{i\varphi}(\tilde{r}, \tilde{z})$ можно оценить как $2\pi\gamma/(Gb) \approx (0.7-3.4) \cdot 10^{-3}$. Принимая для $\Phi_{i\varphi}(\tilde{r}, \tilde{z})$ численные значения, соответствующие сплошным кривым на рис. 2, получаем, что компонента сдвиговой деформации $\varepsilon_{z\varphi}$ (рис. 2, a, b) меняется в интервале от 0 до $\approx (0.7-3.4) \cdot 10^{-3}$, а компонента $\varepsilon_{r\varphi}$ (рис. 2, c) — в интервале от $\approx -(0.3-1.4) \cdot 10^{-3}$ до 0. Таким образом, вблизи свободных поверхностей трубки и кристалла упругая деформация может достигать довольно больших значений в десятые доли процента.

2. Поле перемещений

Для ряда практических приложений (например, для анализа изображений трубок в электронной микроскопии или в рентгеновской топографии высокого разрешения [20]) может представлять интерес также и точное решение для поля перемещений трубки, перпендикулярной свободной поверхности. Такое поле перемещений u_i также рассчитывается с помощью суперпозиции поля перемещений u_i^d винтовой дислокации со сплошным ядром [35]

$$u_\varphi^d = \frac{b}{2\pi} \frac{\tilde{r}}{\tilde{R} + \tilde{z}}, \tag{23}$$

$$u_z^d = \frac{b}{2\pi} \varphi, \tag{24}$$

$$u_r^d = 0, \tag{25}$$

и дополнительного поля перемещений u_i^v виртуальных дисклинационных петель кручения, распределенных по цилиндрической поверхности трубки

$$u_i^v(\tilde{r}, \tilde{z}) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\tilde{z}') u_i^\infty(\tilde{r}, \tilde{z} - \tilde{z}') d\tilde{z}', \tag{26}$$

где $u_i^\infty(\tilde{r}, \tilde{z} - \tilde{z}')$ — поле перемещений дисклинационной петли кручения с линией ($\tilde{r} = 1, \tilde{z} = \tilde{z}'$), расположенной в бесконечной среде. Выражения для $u_i^\infty(\tilde{r}, \tilde{z})$

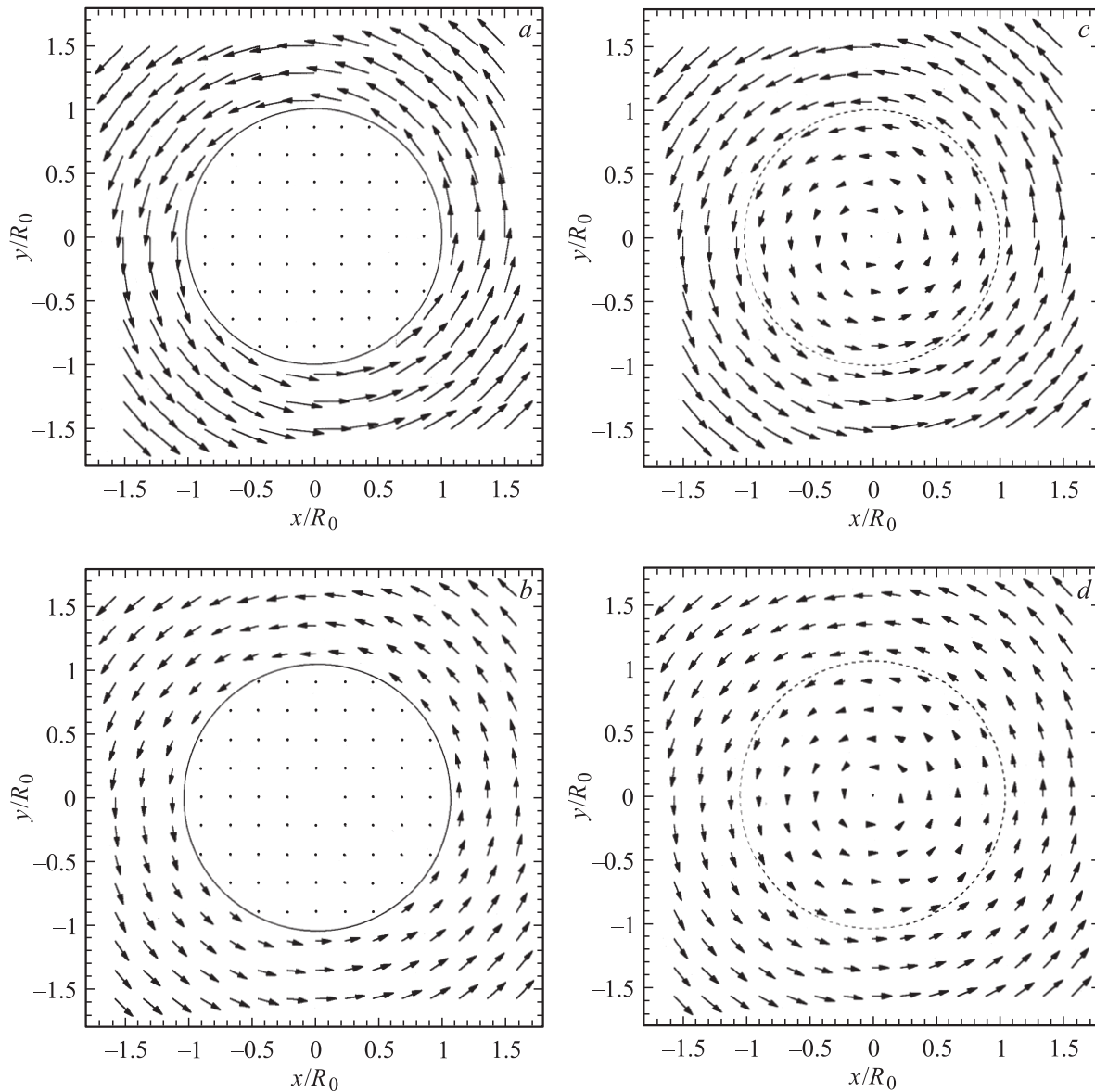


Рис. 3. Перемещения, создаваемые трубками (*a, b*) и винтовыми дислокациями со сплошным ядром (*c, d*) в плоскостях $z = 0$ (*a, c*) и R_0 (*b, d*), параллельных свободной поверхности кристалла. Перемещения u_φ (*a, b*) или u_φ^d (*c, d*) пропорциональны длинам стрелок, определяемым с помощью цифр на осях. Коэффициент пропорциональности равен $b/2$. Окружности $r = R_0$ обозначают поверхности трубок (*a, b*) или приведены для удобства сравнения перемещений, создаваемых трубками и винтовыми дислокациями со сплошным ядром (*c, d*).

имеют вид [36]

$$u_\varphi^\infty = \frac{\omega R_0}{2} \operatorname{sign} \tilde{z} J(2, 1; 0), \quad (27)$$

$$u_r^\infty = u_z^\infty = 0. \quad (28)$$

Теперь поле перемещений u_i^v определяется по формулам (13) и (26)–(28) таким же образом, как и поле напряжений σ_{ij}^v . Проводя соответствующие вычисления, получаем

$$u_\varphi^v = -\frac{b}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{[-K_2(k) + 2/k^2] K_1(\tilde{r}k)}{k K_2(k)} \cos k \tilde{z} dk. \quad (29)$$

$$u_r^v = u_z^v = 0. \quad (30)$$

В итоге искомое поле перемещений u_i равно сумме полей u_i^d (23)–(25), и u_i^v (29) и (30). Как видно из формулы (30), учет свободной поверхности трубки не вызывает изменения компонент поля перемещений u_r и u_z . Вместе с тем свободная поверхность трубки оказывает заметное влияние на третью компоненту поля перемещений u_φ . На рис. 3 показаны перемещения u_φ , создаваемые трубкой на свободной поверхности $z = 0$ (рис. 3, *a*) и в параллельной ей плоскости $z = R_0$ (рис. 3, *b*). Для сравнения на рис. 3, *c* и *d* представлены перемещения u_φ^d , создаваемые в этих же плоскостях

винтовой дислокацией со сплошным ядром. Перемещения u_φ или u_φ^d пропорциональны длинам стрелок, определяемым с помощью цифр на осях. Коэффициент пропорциональности равен $b/2$. Например, на рис. 3, a вблизи поверхности трубки длины стрелок приблизительно равны 0.25, что дает $u_\varphi \approx b/8$. Величины перемещений u_φ и u_φ^d характеризуют степень закручивания материала вблизи свободной поверхности. Как следует из рис. 3, в областях вблизи свободной поверхности трубки создаваемые ею перемещения u_φ существенно превышают перемещения u_φ^d , создаваемые в этих же областях винтовой дислокацией со сплошным ядром. Таким образом, наличие свободной поверхности трубки усиливает закручивание областей кристалла, расположенных вблизи обеих свободных поверхностей (плоской, $z = 0$, и цилиндрической, $r = R_0$). Это согласуется с рис. 2, a , который показывает, что компонента поля напряжений $\sigma_{z\varphi}$ (а следовательно, и деформация $\varepsilon_{z\varphi}$), создаваемого винтовой дислокацией у свободной поверхности кристалла, увеличивается при наличии у такой дислокации полого ядра. Из рис. 3 видно, что перемещение u_φ от трубки, как и перемещение u_φ^d от винтовой дислокации со сплошным ядром, уменьшается при удалении от свободной поверхности $z = 0$.

Следует отметить, что выражения для поля перемещений, вызываемых трубками у свободной поверхности кристалла, необходимы для корректного расчета дифракционного контраста от таких трубок. Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия образцов с невысоким содержанием трубок позволяет определять их векторы Бюргерса. Для случая малоуглового отражения луча от кристаллографических плоскостей вблизи поверхности кристалла вклад в дифракционный контраст вносят обе ненулевые компоненты поля перемещений трубки, u_z и u_φ . Из-за отсутствия точных выражений для этих компонент в работе [20] для расчета дифракционного контраста от трубок у поверхности кристалла использовались поля перемещений от трубок в бесконечной среде или от винтовых дислокаций со сплошным ядром у свободной поверхности. Использование полей перемещений от трубок в бесконечной среде дало плохое соответствие между расчетом и экспериментом. Аппроксимация полями перемещений от винтовых дислокаций у свободной поверхности дала лучшее, но также далеко не полное соответствие. Полученные в настоящей работе точные выражения для полей перемещений от трубок, определяемые формулами (29) и (30), могут быть использованы для устранения остающихся расхождений.

Таким образом, в настоящей работе впервые получены точные выражения для полей напряжений, деформаций и перемещений, создаваемых трубкой (содержащей винтовую дислокацию), перпендикулярной свободной поверхности. Показано, что свободная поверхность трубки оказывает существенное влияние на упругие поля содержащейся в ней дислокации на расстояниях от края трубки порядка ее радиуса. Полученные выражения для

упругих полей прямых трубок использованы авторами для расчета упругих полей подобных же трубок со ступеньками, возникающими при движении приповерхностных сегментов трубок, и сил, действующих на эти сегменты. Кроме того, выражения для поля напряжений трубок могут быть использованы для расчета условий расщепления (и последующего зарастания) трубок в процессе роста кристалла. Например, отщепление от исходной трубки винтовой дислокации со сплошным ядром может происходить посредством образования перегиба дислокационной линии в приповерхностном слое, что сопровождается расщеплением поверхностной ступеньки, связанной с винтовой дислокацией [28]. В том случае, если дислокационный сегмент, отщепившийся от трубки, имеет достаточно большой вектор Бюргерса, он может трансформироваться в отрезок новой трубки. Таким образом может осуществляться ветвление микро-трубок [30]. Детальный анализ условий реализации этого процесса является предметом дальнейших исследований авторов.

Список литературы

- [1] А. Варма. Рост кристаллов и дислокации. ИЛ, М. (1958). 216 с.
- [2] J. Newey. Compound Semiconductor, July 2002 (<http://www.compoundsemiconductor.net/magazine/article/8/7/2/1>).
- [3] W. Qian, M. Skowronski, K. Doverspike, L.B. Rowland, D.K. Gaskill. J. Cryst. Growth **151**, 396 (1995).
- [4] W. Qian, G.S. Rohrer, M. Skowronski, K. Doverspike, L.B. Rowland, D.K. Gaskill. Appl. Phys. Lett. **67**, 16, 2284 (1995).
- [5] E. Valcheva, T. Paskova, P.O.Å. Persson, B. Monemar. Phys. Stat. Sol. (a) **194**, 2, 532 (2002).
- [6] Q. Wahab, A. Ellison, C. Hallin, A. Henry, J. Di Persio, R. Martinez, E. Janzen. Mater. Sci. Forum **338–342**, 1175 (2000).
- [7] I. Kamata, H. Tsuchida, T. Jikimoto, K. Izumi. Jpn. J. Appl. Phys. **40**, part 2, L1012 (2001).
- [8] N. Ohtani, T. Fujimoto, M. Katsuno, T. Aigo, H. Yashiro. In: Technical Digest of Int. Conf. on SiC and Related Materials (ICSCRM 2001), Tsukuba, Japan (2001). P. 192.
- [9] L. Scaltrito, F. Giorgis, C.F. Pirri, P. Mandracci, C. Ricciardi, S. Ferrero, C. Sgorlon, G. Richieri, L. Merlin. J. Phys.: Condens. Matter **14**, 13 397 (2002).
- [10] N. Ohtani, T. Fujimoto, M. Katsuno, T. Aigo, H. Yashiro, J. Cryst. Growth **237–239**, 1180 (2002).
- [11] C.-Y. Hwang, M.J. Schurman, W.E. Mayo, Y.-C. Lu, R.A. Stall, T. Salagaj. J. Electron. Mater. **26**, 3, 243 (1997).
- [12] J. Elsner, R. Jones, P.K. Sitch, V.D. Porezag, M. Elstner, Th. Frauenheim, M.I. Heggie, S. Öberg, P.R. Briddon. Phys. Rev. Lett. **79**, 19, 3672 (1997).
- [13] D. Cherns. J. Phys.: Condens. Matter **12**, 49, 10 205 (2000).
- [14] Z. Liliental-Weber. J. Electron. Mater. **49**, 339 (2000).
- [15] D.D. Avrov, A.S. Bakin, S.I. Dorozhkin. In: Inst. Phys. Conf. Ser. N 142. Ch. 1. Paper pres. at the 6th Int. Conf. on Silicon carbide and related materials-1995 (ICSCRM'95). Kyoto, Japan (1995). P. 73.

- [16] Yu.A. Vodakov, A.D. Roenkov, M.G. Ramm, E.N. Mokhov, Yu.N. Makarov. *Phys. Stat. Sol. (b)* **202**, 1, 177 (1997).
- [17] Z. Liliental-Weber, Y. Chen, S. Ruvimov, W. Swider, J. Washburn. *MRS Proc.* **449**, 417 (1997).
- [18] J. Heindl, H.P. Strunk, V.D. Heydemann, G. Pensl. *Phys. Stat. Sol. (a)* **162**, 1, 251 (1997).
- [19] G. Augustine, H.McD. Hobgood, V. Balakrishna, G. Dunne, R.H. Hopkins. *Phys. Stat. Sol. (b)* **202**, 1, 137 (1997).
- [20] X.R. Huang, M. Dudley, W.M. Vetter, W. Huang, S. Wang, C.H. Carter. *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3, 353 (1999).
- [21] M. Dudley, X.R. Huang, W. Huang, A. Powell, S. Wang, P. Neudeck, M. Skowronski. *Appl. Phys. Lett.* **75**, 6, 784 (1999).
- [22] D. Hofmann, M. Bickermann, R. Eckstein, M. Kolbl, St.G. Muller, E. Schmitt, A. Weber, A. Winnacker. *J. Cryst. Growth* **198–199**, 1005 (1999).
- [23] Л.М. Сорокин, А.С. Трегубова, М.П. Щеглов, А.А. Лебедев, Н.С. Савкина. *ФТТ* **42**, 8, 1384 (2000).
- [24] В.М. Epelbaum, D. Hofmann, U. Hecht, A. Winnacker. In: 3rd European Conf. on SiC and related mater. (ECSRM). Abstr. KlosterBanz, Germany (2000). P. 49.
- [25] I. Kamata, H. Tsuchida, T. Jikimoto, K. Izumi. *Jpn. J. Appl. Phys.* **39**, part 1, 124, 6496 (2000).
- [26] T.A. Kuhr, E.K. Sanchez, M. Skowronski, W.M. Vetter, M. Dudley. *J. Appl. Phys.* **89**, 8, 4625 (2001).
- [27] N. Ohtani, M. Katsuno, T. Fujimoto, T. Aigo, H. Yashiro. *J. Cryst. Growth* **226**, 2/3, 254 (2001).
- [28] В.М. Epelbaum, D. Hofmann. *J. Cryst. Growth* **225**, 1, 1 (2001).
- [29] T.S. Argunova, M.Yu. Gutkin, J.H. Je, H.S. Kang, Y. Hwu, W.-L. Tsai, G. Margaritondo. *J. Mater. Res.* **17**, 10, 2705 (2002).
- [30] M.Yu. Gutkin, A.G. Sheinerman, T.S. Argunova, J.H. Je, H.S. Kang, Y. Hwu, W.-L. Tsai. *J. Appl. Phys.* **92**, 2, 889 (2002).
- [31] F.C. Frank. *Acta Crystallogr.* **4**, 497 (1951).
- [32] P. Pirouz. *Phil. Mag.* **A78**, 3, 727 (1998).
- [33] M.Yu. Gutkin, A.G. Sheinerman. *Phys. Stat. Sol. (b)* **231**, 2, 356 (2002).
- [34] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов. Препринт ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР № 1019. Л. (1986). 62 с.
- [35] S.J. Shaibani, P.M. Hazzledine. *Phil. Mag.* **A44**, 3, 657 (1981).
- [36] T.-W. Chou. *J. Appl. Phys.* **42**, 12, 4931 (1971).
- [37] G. Eason, B. Noble, I.N. Sneddon. *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **247**, 935, 529 (1955).
- [38] В.А. Лихачев, Р.Ю. Хайров. Введение в теорию дисклинаций. Изд-во ЛГУ, Л. (1975). 183 с.
- [39] W. Si, M. Dudley, R. Glass, V. Tsvetkov, C. Carter, Jr. *J. Electron. Mater.* **26**, 3, 128 (1997).