

О пороговых напряжениях при движении дислокаций в примесных полупроводниках

© Б.В. Петухов[¶]

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Российской академии наук,
119333 Москва, Россия

(Получена 3 октября 2006 г. Принята к печати 7 ноября 2006 г.)

Показано, что учет статистических флуктуаций в распределении адсорбированных на дислокациях примесей приводит к наличию порога в подвижности дислокаций, величина которого σ_{th} зависит от температуры и взаимодействия между примесями. В области низких температур σ_{th} может заметно превышать величину напряжения пиннинга σ_{pin} , определяемого средней концентрацией адсорбированных примесей. Результаты расчета могут быть использованы также при описании кинетики одномерных систем другой физической природы.

PACS: 61.72.Lk, 61.72.Yx

1. Введение

Возможность предотвращать движение дислокаций в полупроводниковых устройствах имеет первостепенное значение для их стабильной работы [1,2]. Такую возможность предоставляет наличие так называемых стартовых напряжений σ_{st} (или напряжений открепления — *unlocking stresses*) для страгивания дислокаций с места. Таким образом, интервал нагрузок $\sigma < \sigma_{st}$ дает „окно“, в котором можно избежать движения и размножения дислокаций. Величина этого окна зависит от примесного состава образца, термической обработки и т.п. Изучению стартовых напряжений в полупроводниках посвящено много работ [3–11] и др. В работе [6] закономерности температурной зависимости стартовых напряжений использовались для предсказания допустимых режимов термообработки кремниевых чипов при их изготовлении.

Считается, что стартовые напряжения обусловлены диффузией примесных атомов, например, кислорода или азота к дислокациям и закреплением их (так называемый пиннинг). Сила пиннинга зависит от индивидуальной энергии связи примеси с дислокацией u и от избыточного количества примесей c_d в дислокационном ядре (в расчете на один период решетки a), образующих потенциальную яму глубиной $c_d u$ (также в расчете на один период решетки). В качестве простейшей оценки стартовых напряжений принимают напряжение силового отрыва от примесной атмосферы $\sigma_{st} \approx c_d u / (h a b)$, где h — расстояние между долинами кристаллического рельефа, b — величина вектора Бюргерса дислокации. Возможны случаи, когда роль „примесных центров“, о которых идет речь, играют в действительности стабильные примесные комплексы, например димеры.

Для изучения закономерностей дислокационного пиннинга были проведены детальные эксперименты с предварительной термообработкой образцов, изменяя длительность которой можно создавать контролируемый

избыток примесей в дислокационных ядрах [6,10]. Эти эксперименты выявили ряд отличий данных наблюдений от приведенной простейшей оценки, согласно которой стартовые напряжения должны в основном зависеть от условий термообработки, при которой создается избыточная примесная атмосфера, но в меньшей степени должны были бы быть чувствительными к температуре эксперимента по страгиванию дислокаций с места. Это не согласуется с экспериментальными данным [5,10], что свидетельствует о том, что наблюдаемая величина σ_{st} определяется не только силовым взаимодействием дислокаций с примесями, но существенна также кинетика преодоления центров закрепления. Наблюдаемое убывание σ_{st} с температурой объяснялось аналогией с термоактивируемым процессом преодоления дислокационным сегментом длиной, равной среднему расстоянию между примесями, барьера с высотой, равной энергии связи примесного центра с дислокацией [12]. Такой подход, пренебрегающий связью между примыкающими сегментами дислокации, в состоянии дать лишь качественное описание. Для более последовательного описания экспериментов следовало бы провести расчет, основанный на общепринятом кинковом механизме [13] движения дислокаций в полупроводниках. Это является одной из целей настоящей работы.

Проведенное ранее теоретическое исследование кинетики движения дислокаций в примесных материалах с высоким потенциальным рельефом кристаллической решетки (к которым относятся полупроводники) [14] предсказало возможность существования явлений порогового типа. В рамках сравнительно простой модели влияния вносимой примесной подсистемой неупорядоченности было показано, что при напряжениях ниже некоторой величины σ_{th} движение дислокаций резко замедляется, что дало основания говорить об их квазилокализации [15]. В условиях ограниченного во времени эксперимента σ_{th} может играть роль стартового напряжения. Расчет σ_{th} в работах [14,15] относился к случаю низких концентраций примесей $c_d \ll 1$ в пренебрежении их взаимодействием между собой. Для описания

[¶] E-mail: petukhov@ns.crys.ras.ru

экспериментов с искусственно создаваемым избытком примесей в ядрах дислокаций вплоть до создания равновесных примесных атмосфер (так называемое „старение дислокаций“) [6,10,11] требуется обобщение прежних расчетов на более высокие концентрации. Учет роли возникающего при повышенной концентрации примесей взаимодействия между ними является второй целью настоящей работы. При этом средняя концентрация примесей в объеме образца c по-прежнему будет считаться малой и их взаимодействием пренебрегается.

2. Описание модели

Будем считать, что статистические свойства распределения примесной атмосферы определяются тепловым равновесием (устанавливаемым, например, за счет так называемой трубочной диффузии вдоль дислокации) при температуре T_0 , при которой производится термическая обработка образца. При этом общее содержание примесей на дислокации зависит от времени термообработки и лишь при достаточной длительности этого процесса происходит установление полного равновесия с объемной примесной подсистемой. Ядро дислокации будем моделировать линейной цепочкой занимаемых примесными центрами ячеек, например междоузлий, являющихся центрами притяжения примесей. Вне ядра распределение примесей будем считать хаотическим, отвечающим разбавленному твердому раствору.

Конфигурацию примесной подсистемы на дислокации обозначим символом Γ . Ее можно характеризовать набором чисел заполнения ячеек $\{n_i\}$: если в ячейке с номером i отсутствует примесь, то $n_i = 0$, если имеется примесь, то $n_i = 1$. Очевидно, полное число примесей n на рассматриваемом дислокационном сегменте длиной $l = aN$ равно $n = \sum_{i=1}^N n_i$. Изменение энергии $E\{\Gamma\}$ дислокационного сегмента из-за наличия примесей запишем в виде суммы энергий связи примесей с дислокацией $-u$ и энергией взаимодействия примесей, оказавшихся в соседних междоузлиях u_1 :

$$E\{\Gamma\} = -u \sum_{i=1}^N n_i + u_1 \sum_{i=1}^{N-1} n_i n_{i+1}. \quad (1)$$

Предпочтительность нахождения примесей в ядре дислокации учитывается отрицательным значением энергии связи $-u$ ($u > 0$). Принимается во внимание только взаимодействие между примесями, занимающими соседние ячейки в дислокационном ядре. Значение $u_1 < 0$ моделирует наличие притяжения между примесями, значение $u_1 > 0$ моделирует наличие отталкивания.

Среднее от любой величины A , зависящей от конфигурации примесей в ядре дислокации, записывается в виде

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\Gamma} A\{\Gamma\} \exp \left[\frac{\mu n - E\{\Gamma\}}{kT_0} \right]. \quad (2)$$

Здесь μ — химический потенциал примесей на дислокации, k — постоянная Больцмана, Z — статсумма,

$$Z = \sum_{\Gamma} \exp \left[\frac{\mu n - E\{\Gamma\}}{kT_0} \right]. \quad (3)$$

Суммирование в (2) и (3) выполняется по всевозможным распределениям примесей по ячейкам в дислокационном ядре.

3. Содержание примесей на дислокации и напряжение пиннинга

Средняя концентрация примесей на дислокации c_d может быть выражена через Z как

$$\begin{aligned} c_d &= \frac{\langle n \rangle}{N} = \frac{1}{NZ} \sum_{\Gamma} n\{\Gamma\} \exp \left[\frac{\mu n - E\{\Gamma\}}{kT_0} \right] \\ &= \frac{kT_0}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu}. \end{aligned} \quad (4)$$

При вычислении Z естественно использовать метод, разработанный для модели Изинга (см., например, [16]).

Введем вспомогательную величину Z_N^v , представляющую собой сумму слагаемых $\exp\{(\mu n - E\{\Gamma\})/kT_0\}$, вычисленную по всем конфигурациям Γ при определенном состоянии последнего междоузлия, либо с примесью ($v = 1$), либо пустом ($v = 0$). Воспользовавшись явным видом выражения для энергии конфигурации (1), можно записать рекуррентные соотношения для дислокационных сегментов с длиной, отличающейся на одно звено:

$$Z_{N+1}^0 = Z_N^0 + Z_N^1, \quad (5)$$

$$Z_{N+1}^1 = Z_N^0 \exp[(\mu + u)/kT_0] + Z_N^1 \exp[(\mu + u - u_1)/kT_0]. \quad (6)$$

Вводя матрицу перехода $V_{v\mu}$, элементы которой ясны из формул (5)–(6), можно переписать рекуррентные соотношения в виде

$$Z_{N+1}^v = \sum_{\mu} V_{v\mu} Z_N^{\mu}. \quad (7)$$

N -кратное применение соотношения (7) позволяет выразить Z_{N+1}^v через вектор состояния первого звена Z_1^v и произведение переходных матриц

$$Z_{N+1}^v = \sum_{\mu} (V^N)_{v\mu} Z_1^{\mu}. \quad (8)$$

Зависимость Z_N^v от N при больших N , как известно из теории матриц, дается фактором λ_1^N , где λ_1 есть максимальное собственное значение переходной матрицы (при больших N влияние граничных условий становится несущественным и V^N зависит от N так же, как след этой матрицы $Tr(V^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N$ с преобладающим вкладом максимального собственного значения λ_1).

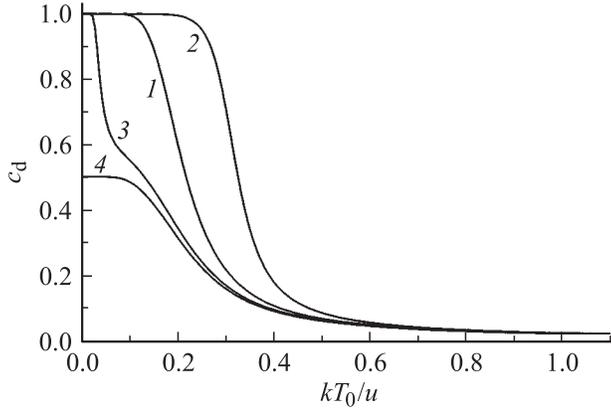


Рис. 1. Рассчитанная зависимость содержания примесей на дислокации c_d от температуры T_0 , при которой производится „старение“, при различной энергии взаимодействия примесей: $u_1 = 0$ (кривая 1), $u_1 = -0.5u$ (2), $u_1 = 0.4u$ (3), $u_1 = 0.8u$ (4). Объемная концентрация примесей $c = 0.01$.

Решая характеристическое уравнение для матрицы V , находим

$$\lambda_1 = 0.5 \left\{ 1 + \exp(\mu/kT_0)e_1 + \left[[1 - \exp(\mu/kT_0)e_1]^2 + 4 \exp(\mu/kT_0)e_0 \right]^{1/2} \right\}. \quad (9)$$

Здесь введены обозначения $e_0 = \exp(u/kT_0)$, $e_1 = \exp[(u - u_1)/kT_0]$. Соответственно $Z \approx \lambda_1^N$ и, согласно (4),

$$c_d = \exp\left(\frac{\mu}{kT_0}\right) \frac{e_1 + [2e_0 - e_1(1 - \exp(\mu/kT_0)e_1)] / \left\{ [1 - \exp(\mu/kT_0)e_1]^2 + 4 \exp(\mu/kT_0)e_0 \right\}^{1/2}}{1 + \exp(\mu/kT_0)e_1 + \left\{ [1 - \exp(\mu/kT_0)e_1]^2 + 4 \exp(\mu/kT_0)e_0 \right\}^{1/2}} \quad (10)$$

При равновесии примесей в дислокационной атмосфере и в объеме материала химический потенциал μ равен своему объемному значению, которое можно принять соответствующим идеальному разбавленному раствору $\mu = kT_0 \ln c$. Подставляя это значение в (10), получаем для равновесного содержания примесей на дислокации

$$c_d^{eq} = c \frac{e_1 + [2e_0 - e_1(1 - ce_1)] / \left\{ (1 - ce_1)^2 + 4ce_0 \right\}^{1/2}}{1 + ce_1 + \left\{ (1 - ce_1)^2 + 4ce_0 \right\}^{1/2}}. \quad (11)$$

При отсутствии взаимодействия между примесями ($u_1 = 0$) из (11) следует хорошо известный результат

$$c_d^{eq} = c \frac{\exp(u/kT_0)}{1 + c \exp(u/kT_0)} \quad (12)$$

„фермиевского“ типа, учитывающий лишь стерическое взаимодействие между примесями, т.е. невозможность

попадания в одну ячейку более одного примесного центра, так что концентрация выходит при $T_0 \rightarrow 0$ на насыщение с максимально возможным значением $c_d = 1$. Температурное поведение содержания примесей на дислокации при наличии взаимодействия, как притяжения, так и отталкивания, проиллюстрировано на рис. 1. Обращает на себя внимание изменение низкотемпературного предела c_d при увеличении отталкивания примесей: для $u_1 > 0.5u$ более энергетически выгодным оказывается половинное заполнение с отсутствием ближайших соседей.

Представляет интерес также плотность средней энергии примесной подсистемы на дислокации $\langle E \rangle / N$, характеризующая усредненную глубину потенциальной „ямы“, из которой дислокация должна выбираться. Из определения статсуммы (3) нетрудно вывести соотношение $\langle E \rangle / N = \mu c_d + (kT_0^2 / N) \partial \ln Z / \partial T_0 = \mu c_d + kT_0^2 \partial \ln \lambda_1 / \partial T_0$ и, используя результат (9), получить

$$\frac{\langle E \rangle}{N} = - \frac{\exp(\mu/kT_0)e_1}{2\lambda_1} \times \left\{ u - u_1 + \frac{2u \exp(u_1/kT_0) - [1 - \exp(\mu/kT_0)e_1](u - u_1)}{\sqrt{[1 - \exp(\mu/kT_0)e_1]^2 + 4 \exp(\mu/kT_0)e_0}} \right\}. \quad (13)$$

Дислокация может оторваться от своей примесной атмосферы, лишь если работа внешнего напряжения при переходе в следующую долину кристаллического рельефа σhab превысит энергию пиннинга (13). Это условие определяет напряжение пиннинга $\sigma_{pin} = -\langle E \rangle / (habN)$. В равновесии

$$\sigma_{pin} = \frac{c \exp[(u - u_1)/kT_0]}{hab} \left\{ u - u_1 + \frac{2u \exp[u_1/kT_0] - (1 - c \exp[(u - u_1)/kT_0])(u - u_1)}{\sqrt{(1 - c \exp[(u - u_1)/kT_0])^2 + 4c \exp[u/kT_0]}} \right\} / \left\{ 1 + c \exp[(u - u_1)/kT_0] + \sqrt{(1 - c \exp[(u - u_1)/kT_0])^2 + 4c \exp[u/kT_0]} \right\}. \quad (14)$$

При отсутствии взаимодействия между примесями на дислокации ($u_1 = 0$) напряжение пиннинга (14) сводится к упоминавшейся выше формуле $\sigma_{pin} = c_d u / (hab)$, но при наличии притяжения с увеличением концентрации примесей (понижением T_0) роль взаимодействия нарастает и „коэффициент“ при c_d увеличивается от u до $u + u_1$.

При достаточно высокой температуре эксперимента по движению состаренных дислокаций σ_{pin} играет роль стартовых напряжений. Однако при понижении температуры эксперимента возрастает роль статической неоднородности примесной атмосферы и оценка стартовых напряжений может измениться.

4. Пороговое напряжение

Как известно, дислокации в полупроводниковых материалах движутся за счет термоактивируемого рождения и перемещения дислокационных перегибов, называемых кинками [13]. Ввиду случайно неоднородного характера примесной атмосферы на дислокации, образующейся в результате хаотической диффузии примесей в ее ядро, следует рассмотреть модификацию кинкового механизма полем случайно расположенных вдоль дислокации примесных центров. Флуктуации плотности примесей вдоль дислокации создают случайный спектр барьеров с различными временами задержки кинков на них τ_1, τ_2, \dots . Для нахождения средней скорости движения кинков представляет интерес определение среднего времени преодоления барьера кинком $\langle \tau \rangle$. При вычислении среднего времени задержки кинка на барьере, образованном некоторой флуктуацией плотности примесной атмосферы на дислокации, воспользуемся явным выражением для времени преодоления потенциального барьера одномерной частицей [17]

$$\tau = \tau_* \int_0^{\infty} \exp \left[\frac{\Delta E(x)}{kT} \right] dx. \quad (15)$$

Здесь $\Delta E(x)$ — потенциальный рельеф для перемещения частицы. В интересующем нас случае $\Delta E(x) \approx -E\{\Gamma\} - \sigma hb x$ есть разность энергий дислокационного сегмента длиной x в долинах кристаллического рельефа, между которыми осуществляется переход (энергией разреженной примесной подсистемы вне ядра пренебрегаем), τ_* — несущественный для дальнейшего коэффициент. Дополнительно учтен вклад работы внешнего напряжения σ . Предполагается, что за время преодоления кинком барьера при температуре эксперимента T конфигурация примесных центров не успевает измениться.

Производя усреднение под знаком интеграла в (15), получаем

$$\langle \tau \rangle = \tau_* \int_0^{\infty} \left\langle \exp \left[-\frac{E\{\Gamma\}}{kT} \right] \right\rangle \exp(-\sigma hb x) dx. \quad (16)$$

Ранее [14,18] фигурирующее в (16) среднее вычислялось для случая сравнительно низких концентраций примесей в пренебрежении взаимодействием между ними. Для выяснения качественных изменений, вносимых при более высоких концентрациях примесей, произведем обобщенный расчет в рамках модели, учитывающей взаимодействие примесей, попадающих в соседние междоузлия. Используем с этой целью простую модификацию вычислений, приведенных выше. Экспоненциальный вид усредняемой в (16) функции позволяет получить ответ простой заменой параметров в уже полученном решении для Z . Сравнение показателей экспонент в (16)

и (3) показывает, что интересующее нас среднее можно представить в виде

$$\left\langle \exp \left[-\frac{E(\Gamma)}{kT} \right] \right\rangle = Z'/Z = (\lambda'_1/\lambda_1)^N, \quad (17)$$

где Z' и λ'_1 получаются из Z и λ_1 заменой $u \rightarrow u(1 + T_0/T)$, $u_1 \rightarrow u_1(1 + T_0/T)$. Явное выражение для λ'_1 имеет, таким образом, вид

$$\begin{aligned} \lambda'_1 = & 0.5 \{ 1 + \exp[\mu/kT_0 + (u - u_1)(1/kT_0 + 1/kT)] \\ & + ((1 - \exp[\mu/kT_0 + (u - u_1)(1/kT_0 + 1/kT)])^2 \\ & + 4 \exp[(\mu + u)/kT_0 + u/kT])^{1/2} \}. \end{aligned} \quad (18)$$

Собирая все факторы, дающие зависимость подинтегрального выражения в (16) от N , получаем

$$\exp\{(x/a) \ln(\lambda'_1/\lambda_1) - \sigma hb x/kT\}. \quad (19)$$

Следовательно, интеграл сходится при $\sigma > \sigma_{th}$, где

$$\sigma_{th} = \frac{kT}{hab} \ln(\lambda'_1/\lambda_1), \quad (20)$$

и расходится при $\sigma \leq \sigma_{th}$. Последнее означает обращение в бесконечность среднего времени преодоления образованных флуктуациями концентрации примесей барьеров для перемещения кинков и, следовательно, обращение в нуль средней скорости движения кинков. При $\sigma > \sigma_{th}$, $\sigma \rightarrow \sigma_{th}$ среднее время перехода пропорционально $1/(\sigma - \sigma_{th})$. Соответственно средняя скорость движения кинков

$$V_{av} \propto (1 - \sigma_{th}/\sigma)V_0, \quad (21)$$

где V_0 — скорость кинков в чистом материале. Таким образом, наличие порог подвижности, свидетельствующий о существенном замедлении движения дислокаций.

Формула (20) при λ_1 и λ'_1 , даваемыми уравнениями (9) и (18) соответственно, выражает пороговое напряжение через химический потенциал примесей на дислокации μ и позволяет найти σ_{th} как функцию концентрации примесей на дислокации c_d . Для этого надо либо обратиться к формуле (10) функции $c_d(\mu)$ (например, численно) и подставить $\mu(c_d)$ в (20), либо получить с помощью формул (10), (20) параметрическое представление $\sigma_{th}(c_d)$ с μ в качестве параметра. При отсутствии взаимодействия между примесями формулы значительно упрощаются и нетрудно получить явное представление

$$\sigma_{th} = \frac{kT}{hab} \ln \left\{ 1 + c_d \left[\exp \left(\frac{u}{kT} \right) - 1 \right] \right\}, \quad (22)$$

согласующееся с прежним результатом [18]. Эти выражения представляют интерес для описания экспериментов с небольшими временами старения дислокаций, когда число адсорбированных примесей зависит от длительности термообработки. При установлении равновесия между примесями на дислокации и в объеме материала химический потенциал приобретает равновесное значение $\mu_{eq} = kT_0 \ln c$, подстановка которого в (20) при-

водит к следующему выражению для порогового напряжения:

$$\sigma_{th} = \frac{kT}{hab} \ln \left\{ \frac{1 + c \exp \left[(u - u_1) \left(\frac{1}{kT} + \frac{1}{kT_0} \right) \right] + \sqrt{\left(1 - c \exp \left[(u - u_1) \left(\frac{1}{kT} + \frac{1}{kT_0} \right) \right] \right)^2 + 4c \exp \left[u \left(\frac{1}{kT} + \frac{1}{kT_0} \right) \right]}}{1 + c \exp \left(\frac{u - u_1}{kT_0} \right) + \sqrt{\left[1 - c \exp \left(\frac{u - u_1}{kT_0} \right) \right]^2 + 4c \exp \left(\frac{u}{kT_0} \right)}} \right\}. \quad (23)$$

При отсутствии взаимодействия примесей формула (23) переходит в упрощенное выражение

$$\sigma_{th} = \frac{kT}{hab} \ln \frac{1 + c \exp[u/(kT_0 + 1/kT)]}{1 + c \exp[u/kT_0]}. \quad (24)$$

Исследуем температурную зависимость общей формулы (23). Прежде всего убедимся, что при высоких температурах $\sigma_{th} \rightarrow \sigma_{pin}$. Чтобы показать это, рассмотрим поведение Z' при высоких температурах. Введем обозначение $\beta = 1/kT$ и напишем разложение Z' при $\beta \rightarrow 0$: $Z' \approx Z'|_{\beta=0} + \beta \partial Z' / \partial \beta|_{\beta=0}$. Из определения Z' (17) следует $Z'|_{\beta=0} = Z$, $\partial Z' / \partial \beta|_{\beta=0} = -Z\langle E \rangle$. Формула (20) дает при $\beta \rightarrow 0$

$$\sigma_{th} = \frac{kT}{habN} \ln \frac{Z'}{Z} \approx \frac{1}{\beta habN} \ln(1 - \beta \langle E \rangle) \approx \frac{\langle E \rangle}{habN} = \sigma_{pin}.$$

В противоположном низкотемпературном пределе $T \rightarrow 0$, как следует из (23), пороговое напряжение стремится к $u - u_1$ в случае притяжения или небольшого отталкивания между примесными центрами $u_1 < u/2$ и к $u/2$ при достаточно большом отталкивании $u_1 > u/2$. Эти величины коррелируют с заполнением дислокационного ядра в случае его насыщения, что свидетельствует о том, что пороговое напряжение определяется большими флуктуациями плотности примесных центров, а не средним заполнением.

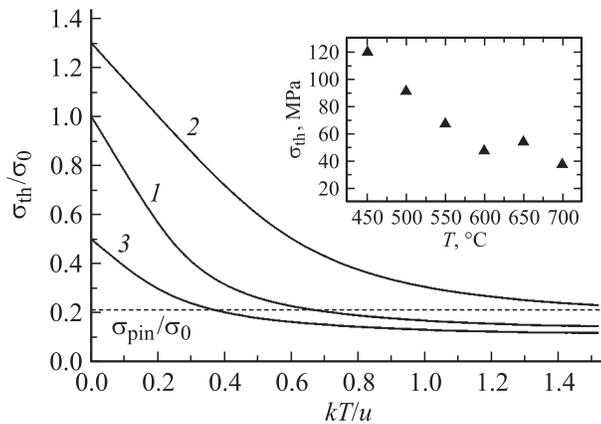


Рис. 2. Температурная зависимость порогового напряжения σ_{th} при различной энергии взаимодействия примесей между собой: $u_1 = 0, c_d = 0.109$ (кривая 1); $u_1 = -0.3u, c_d = 0.136$ (2); $u_1 = 0.5u, c_d = 0.095$ (3). Объемная концентрация примесей $c = 0.01$. Штриховая линия показывает напряжение пиннинга при $u_1 = -0.3u$. Нормирующее напряжение $\sigma_0 = u/(hab)$. На вставке — экспериментальные данные [10] для Si с примесями кислорода ($6.3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$), длительность отжига при температуре 730°C составляла 90 мин.

Рассчитанное с помощью формулы (23) поведение порогового напряжения в широком интервале температур проиллюстрировано на рис. 2. В отличие от атермической (по отношению к температуре эксперимента T) оценки стартовых напряжений посредством силы пиннинга, выражение (23) предсказывает заметный рост σ_{th} при убывании температуры. Это качественно согласуется с экспериментальными данными [10] для кремния с примесями кислорода, показанными на вставке к рис. 2.

5. Заключение

Для объяснения наблюдаемого в экспериментах [5,10] заметного убывания стартовых напряжений с температурой в настоящей работе предлагается принять во внимание предсказанные ранее [14,15] явления порогового типа при движении дислокационных кинков, обусловленные статистическими флуктуациями в пространственном распределении примесной атмосферы. Кинетика преодоления образованных этими флуктуациями барьеров на пути движения кинков определяет величину порогового напряжения σ_{th} и его температурную зависимость. Эта интерпретация в рамках кинкового механизма предлагается альтернативой отрыву искусственно обособленного дислокационного сегмента от единичного примесного центра.

С целью описания экспериментов со специально контролируемым образом состаренными дислокациями, имеющими в своем ядре повышенную концентрацию примесей, произведен обобщенный расчет с учетом возможного взаимодействия примесей между собой. Ценой некоторых упрощений модельного характера, таких как учет влияния лишь примесных центров, находящихся непосредственно в дислокационном ядре, и взаимодействия только между ближайшими соседями, получены явные выражения, описывающие заполнение дислокаций примесями, напряжение пиннинга и температурную зависимость порогового напряжения. Эти выражения наглядно демонстрируют характер обусловленной взаимодействием примесей модификации условий возникновения порога подвижности кинков. Одним из качественных эффектов, к которым приводит наличие взаимодействия между примесными центрами, является нарушение однозначного соответствия между величинами энергии связи и стартовыми напряжениями, что иногда наблюдается экспериментально. Так, по данным [10], примесные центры, создаваемые в кремнии атомами азота (димеры),

имеют энергию связи с дислокациями 1.7 эВ, превышающую энергии связи атомов кислорода 0.74 эВ, однако стартовые напряжения (при единичной плотности центров) имеют обратное соотношение, 4Па·см (N) и 7Па·см (O).

Согласно результатам расчета, пороговое напряжение σ_{th} близко к напряжению пиннинга σ_{pin} при относительно высоких температурах и превышает σ_{pin} при более низких температурах, так как в отличие от σ_{pin} растет с понижением температуры. Порог при $\sigma = \sigma_{th}$ имеет размытый характер, так что в принципе некоторое движение дислокаций возможно и при $\sigma < \sigma_{th}$, хотя и со значительно меньшей подвижностью, описываемой как аномальная кинетика (говорят не об истинной локализации, а о „квазилокализации“ [15,19–21]). Таким образом, можно предположить, что экспериментально измеряемые за конечное время стартовые напряжения будут находиться в интервале $\sigma_{pin} \leq \sigma \leq \sigma_{th}$, что позволяет качественно объяснить наблюдаемые данные.

Отметим, наконец, что аналогичные описанным эффекты могут также иметь место в кинетике ряда систем другой физической природы: ступеней на поверхности кристалла, доменных границ в двумерных фазах на подложках, полимерных макромолекул и т. п.

Список литературы

- [1] K. Sumino. In: *Defects and Properties of Semiconductors: Defect Engineering*, ed. by J. Chikawa, K. Sumino, K. Wada (KTK Scientific Publishers, Tokyo, 1987) p. 227.
- [2] М.Г. Мильвидский, В.Б. Освенский. *Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников* (М., Металлургия, 1984).
- [3] V.N. Erofeev, V.I. Nikitenko, V.B. Osvenskii. *Phys. Status Solidi*, **35**, 79 (1969).
- [4] K. Sumino, M. Imai. *Philos. Mag. A*, **47**, 753 (1983).
- [5] I. Yonenaga. *Sol. St. Phenomena*, **95–96**, 423 (2004).
- [6] S. Senkader, A. Giannattasio, R.J. Falster, P.R. Wilshaw. *Sol. St. Phenomena*, **96–95**, 43 (2004).
- [7] В.А. Макара. Препринт АН УССР ИПМ-86-2. Киев, ИЭС им. Пагона (1986).
- [8] М.В. Бадылевич, Ю.Л. Иунин, В.В. Кведер, В.И. Орлов, Ю.А. Осипьян. *ЖЭТФ*, **124**, 664 (2003).
- [9] V. Orlov, Yu.L. Iunin, M.V. Badylevich, O. Lysitskiy, H. Richter. *Sol. St. Phenomena*, **95–96**, 465 (2004).
- [10] A. Giannattasio, S. Senkader, R.J. Falster, P.R. Wilshaw. *Physica B*, **340–342**, 996 (2003).
- [11] K. Sumino. *Phys. Status Solidi A*, **171**, 111 (1999).
- [12] M. Sato, K. Sumino. *Proc. 9th Yamada Conference on Dislocations in Solids*, ed. by H. Suzuki, T. Ninomiya, K. Sumino, S. Takeuchi (Univ. Tokyo Press, Tokyo 1985) p. 39.
- [13] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций* (М., Атомиздат, 1972).
- [14] Б.В. Петухов. *ФТТ* **13**, 1445 (1971).
- [15] Б.В. Петухов. *ФТТ* **30**, 2893 (1988).
- [16] Р. Бекстер. *Точно решаемые модели в статистической механике* (М., Мир, 1985).
- [17] S. Chandrasekhar. *Rev. Mod. Phys.*, **15**, 1 (1943).

- [18] Yu.L. Iunin, V.I. Nikitenko, V.I. Orlov, B.V. Petukhov. *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 3137 (1997).
- [19] J.-P. Bouchaud, A. Georges. *Comm. Cond. Mater. Phys.*, **15**, 125 (1991).
- [20] J. Bernasconi, W.R. Schneider. *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 1643 (1981).
- [21] J.-P. Bouchaud, A. Georges. *Phys. Rev.*, **195**, 127 (1990).

Редактор Л.В. Беляков

On threshold stresses for dislocation motion in impure semiconductors

B.V. Petukhov

Shubnikov Institute of Crystallography
Russian Academy of Sciences,
119333 Moscow, Russia

Abstract It has been shown that statistical fluctuations in distribution of impurities segregated at dislocations results in a threshold in dislocation mobility which magnitude σ_{th} depends on temperature and interaction between impurities. At a low temperature range σ_{th} may be significantly higher than the pinning stress σ_{pin} determined by an averaged concentration of the segregated impurities. Results of the calculation can be also used at a description of kinetics of one-dimensional systems of another nature.