

## **КРИСТАЛЛОФИЗИКА**

УДК 539.87

### **КИНЕТИКА ДИСЛОКАЦИОННОГО ТЕЧЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

**Ю. М. Смирнов**

Тверской государственной университет,  
*кафедра прикладной физики*

Проведены оценки скоростей движения дислокаций в монокристаллах кремния. Показана роль поверхностной энергии в образовании дислокаций.

Сугубо прагматические требования вызвали появление в 1950 – 60-е годы большого количества работ, связанных с дислокациями в кристаллах, в основном – германия и кремния. В настоящее время таких работ мало, и в большинстве они являются чисто теоретическими. В то же время трактовку дислокационного течения при росте кристаллов нельзя считать окончательно сформулированной. Например, по вопросу причин образования дислокаций при росте монокристаллов обычно приводятся или почти два десятка причин или кратко сообщается, что существо вопроса – в термохимических напряжениях. Сведения о скоростях образования дислокаций весьма разнообразны, а «критическое» место их образования строго не определено.

В упомянутое выше время были опубликованы экспериментальные работы по связи плотности дислокаций в германии с градиентом температур на фронте кристаллизации и с кривизной этого фронта. несколько работ было связано с созданием технологии выращивания бездислокационного германия [1-4].

В последние годы нами изучается воздействие отжига на один из видов дислокационного течения. Это связано с влиянием малоугловых дислокационных границ и скоплений дислокаций на качество крупногабаритных монокристаллов германия, применяемых в инфракрасной оптике [4]. Движение дислокаций при отжиге принципиально отлично от образования и распространения дислокаций в процессе роста кристалла. Обычно рост кристалла является стационарным, дислокации зарождаются на фронте кристаллизации (включая и затравку), а заканчиваются на боковой поверхности или фронте кристаллизации. Скорость распространения дислокаций в этом случае соизмерима со скоростью роста кристалла. При переходе режима роста в нестационарный, например, при отрыве кристалла из расплава, на фронте кристаллизуется в сугубо нестационарном режиме «капля», и

возникшие при этом дислокации распространяются в термопластичной зоне, границей которой для германия является поверхность с температурой около 820 К. Скорость распространения этих дислокаций иная. Она сравнима со скоростью акустических фононов и для германия, в зависимости от кристаллографического направления, находится в пределах  $(3,0...5,0) \cdot 10^3$  м·с<sup>-1</sup>. Такая картина в основных чертах относится и к кремнию. Эти процессы нами подробно изучены на примерах бездислокационного германия [1]. Для кремния ситуация несколько отлична от германиевой в связи с разницей в технических свойствах этих материалов. Для изучения нестационарности на кремнии удалось получить случай резкого перехода от бездислокационного его роста к дислокационному.

Процесс рождения дислокаций в термопластичной зоне кремния отразился даже на виде поверхности монокристалла с диаметром 60 мм. Картина выхода дислокаций на поверхность показана на рис. 1. Размер термопластичной зоны в этом случае был равен 55 мм.

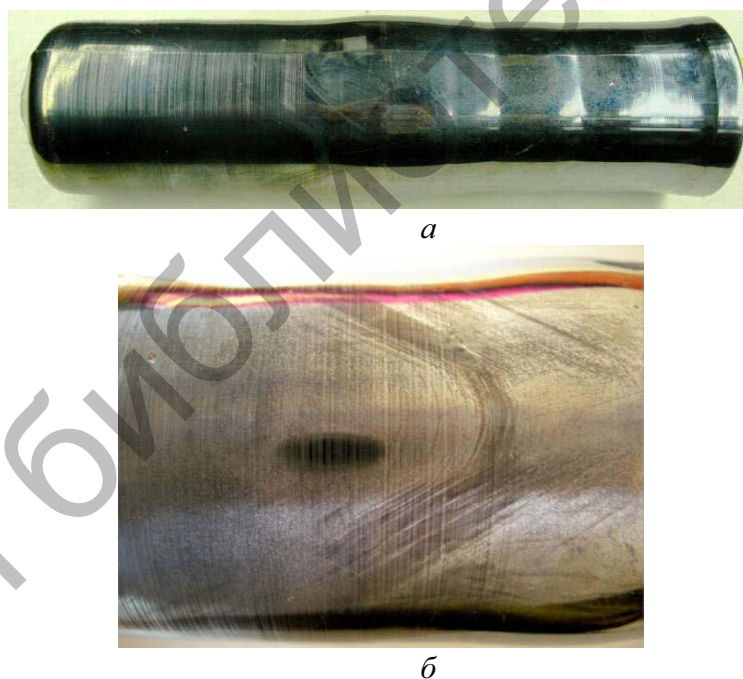


Рис.1. Образование дислокаций в монокристалле кремния при резком изменении температурного режима: а) монокристалл, состоящий из бездислокационной (слева) и дислокационной (справа) частей; б) средняя часть монокристалла с хорошо заметными следами появившихся дислокаций на поверхности ( $\times 1,5$ ).

В данном случае скорость распространения рождавшихся дислокаций находилась как раз на уровне, приведенном выше. Тем не менее, причины возникновения дислокаций одни и те же – искажения фронта кристаллизации, возникновения термохимических напряжений и их релаксация при уровне выше практического. А скорости распространения их в объеме монокристалла отличаются на 8 порядков, т. к. скорости роста кристаллов (и вместе с ними – распространения ростовых дислокаций) близки к величине  $(2...3) \cdot 10^{-5} \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}$ .

Поверхность фронта кристаллизации при росте по Чохральскому в стационарных условиях обычно представляет собой параболу с плавным изменением кривизны, которое для монокристаллов диаметрами 25...30 мм не весьма существенно, что сказывается и на коллективе дислокаций, часто расположенных модулированно, на практически равных расстояниях друг от друга. Это конечно, не относится к бездислокационным монокристаллам, где дислокации редки (порядка 1...3 дислокаций на  $\text{см}^2$ , а в ряде случаев их в монокристаллах вообще нет). В этих случаях можно провести аналогию между дислокациями и так называемыми "квантовыми нитями". Монокристаллы с диаметрами более 30...40 мм имеют существенные нарушения структуры – малоугловые границы, а в ряде случаев по существу – блочную структуру с разориентацией блоков в десятки угловых секунд, а иногда и более.

В свете изложенного действующей термодинамической силой процесса образования дислокаций можно считать силу, сочетающую в себе две четных тензорных величины (полярные тензоры второго ранга) – тензор напряжений и тензор релаксаций.

Уравнение локального баланса энергии для дислокационного течения в твердом теле (монокристалле) имеет вид:

$$dU = TdS - \sigma_{ki} d\epsilon_{ik} - \sum_{p=1} A_p d\xi_p,$$

где  $U$  – энергия,  $\vec{\sigma}$  и  $\vec{\epsilon}$  – тензоры напряжений и деформаций,  $\xi_p$  – параметр, описывающий ближний порядок в твердокристаллическом теле,  $A_p$  – величина, сопряженная с этим параметром.

В неравновесной термодинамике величины вида  $A$  обычно рассматриваются как термодинамические движущие силы, сходные с химическим средством (релаксационное средство).

Но все возможные действующие силы этим подходом не исчерпываются. Одной из участвующих в процессе сил может быть свободная поверхностная энергия [5]. Она вносит коррективы в формирование границ раздела фаз. Эта граница может быть отождествлена с фронтом кристаллизации. Свободная энергия обычно

рассматривается как скалярная величина. при описании перехода  $L \rightarrow S$ , она может трактоваться как поверхностное натяжение, а с учетом прилегающей части объема – как тензорная величина, именуемая поверхностным натяжением. Все эти величины имеют одну и ту же общую характеристику – четность, и описываются группами симметрии второго ряда:  $\infty/\infty m$ ,  $\infty/m$  и  $\frac{\infty}{m} m m$ . Следует иметь в виду, что это

деление является скорее формальным, связанным лишь с удобством использования какой-то из этих величин в разных случаях. Но при рассмотрении, например, образования малоугловых границ (МУГ) в монокристаллах обязателен учет роли поверхностной энергии.

Примером необходимости такого учета являются МУГ в монокристаллах германия большого диаметра. Как правило, на сечении в плоскости (111) МУГ направлены по направлениям  $\langle 112 \rangle$  или близким к ним. МУГ стабильные дефекты в монокристаллах. Они связаны с пирамидальным строением монокристалла. МУГ по расположению коррелируют с контактами пирамид роста  $\{111\}$  и, вероятно, в значительной степени обусловлены некогерентным срастанием этих пирамид в монокристаллах.

К сожалению, проблема ликвидации МУГ в крупногабаритных монокристаллах германия в полном объеме до сих пор остается нерешенной.

#### Список литературы

1. Смирнов Ю. М. Выращивание бездислокационных монокристаллов германия // Цветные металлы. № 5. 1977. С. 48-49.
2. Смирнов Ю. М. Распределение дислокаций в монокристаллах германия // Известия АН СССР. Серия физическая. Т. XXXVI. Вып. 3. 1972. С. 534-536.
3. Смирнов Ю. М. Управление дефектностью кристаллов, растущих из расплава // Физика кристаллизации. Калинин. 1986. С. 19-36.
4. Smirnov Yu. M., Kaplunov I. A., Dolmatov A. B. Dislocation generation in dislocation-free germanium // Russian Physics Journ. 2005. V. 48, № 4. P. 460-464.
5. Смирнов Ю. М. Симметрично-термодинамический анализ роста кристаллов из расплава // Физика кристаллизации. Калинин. 1985. С. 18-22.