

УДК 548.5

## МАЛОУГЛОВЫЕ ГРАНИЦЫ В КРИСТАЛЛАХ ГЕРМАНИЯ

Г.С. Блохина, А.И. Иванова, А.М. Иванов, Т.Е. Гурьева

Тверской государственный университет,  
кафедра прикладной физики

Рассмотрена кристаллография малоугловых дислокационных границ и их влияние на миграцию дислокаций.

На оптические свойства германия – прежде всего поглощение и рассеяние инфракрасного излучения – в значительной мере влияют примеси и структурные дефекты, например, скопления дислокаций, границы блоков, включения второй фазы и малоугловые границы.

Крупногабаритные монокристаллы, применяемые в ИК технике являются сочетанием пирамид роста различных граней серий  $\{1\bar{1}\bar{1}\}$  и  $\{\bar{1}11\}$ . Их границы, обладая определенной некогерентностью, при движении дислокаций являются барьерами. В монокристаллах, выращиваемых в направлении  $\langle 111 \rangle$ , эти границы соответствуют направлениям  $\langle 112 \rangle$ . Так как при неизменной кривизне фронта кристаллизации все дислокации имеют одинаковый знак, процесс взаимной аннигиляции не является причиной уменьшения их плотности. Остается лишь возможность дрейфа дислокаций к периферии монокристалла и их релаксация на границе раздела фаз.

В настоящей работе изучено распределение дислокаций в кристалле германия, их перераспределение после отжига и влияние малоугловых границ на движение дислокаций. Рассмотрен механизм влияния дислокаций и малоугловых границ на оптические свойства кристаллов германия.

На рис. 1 показана макрокартина распределения дислокаций в выращенном монокристалле германия диаметром 60 мм. Малоугловые границы (МУГ) в основном проходят по направлениям  $[\bar{1}\bar{1}2]$  или близким к ним. Иногда они появляются и в направлениях  $[1\bar{1}0]$ . Значительная часть МУГ – прямые отрезки. Остальные несколько изогнуты, что может быть объяснено отклонениями от вертикальной ориентации направления роста  $[111]$  и, соответственно, горизонтальной ориентации грани. Плотность дислокаций рассчитывалась по трем направлениям  $\langle 110 \rangle$  и направлению  $[112]$  по диаметру кристалла с шагом 5 мм, исключая области с МУГ. Результаты представлены на рис. 2. Плотность дислокаций в области МУГ рассчитывалась отдельно. Затем образец был отожжен в вакууме в течение 50 часов при средней температуре  $890\text{ }^\circ\text{C}$  ( $\pm 5\text{ }^\circ\text{C}$ ). Отжиг осуществлялся в линейном

градиентном температурном поле, величина градиента температур составляла  $520 \text{ град}\cdot\text{м}^{-1}$ . Распределение плотности дислокаций на отожженном кристалле представлено на рис. 3.

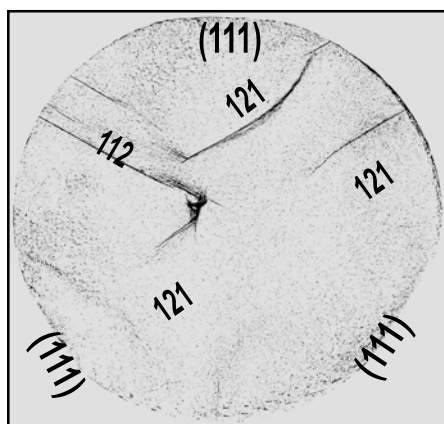


Рис. 1. Макрокартина распределения дислокаций в монокристалле германия

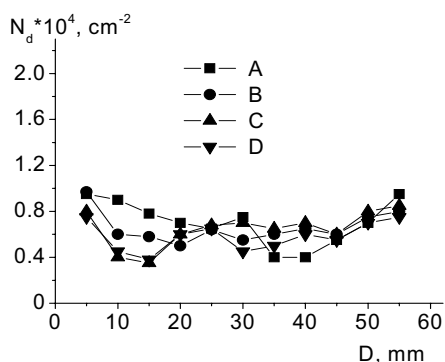


Рис. 2. Распределение дислокаций до отжига по направлениям: А – [112]; В, С, D – {110}

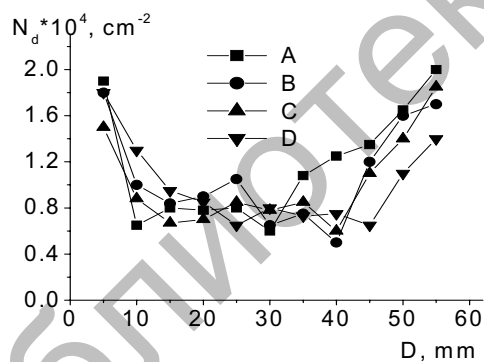


Рис. 3. Распределение дислокаций после отжига по направлениям: А – [112]; В, С, D – {110}

В результате высокотемпературного отжига происходит перераспределение дислокаций: часть из них концентрируется на МУГ, совпадающих с направлениями  $\langle 112 \rangle$ , и значительная часть мигрирует на периферию монокристалла. Если средняя плотность дислокаций по кристаллу составляет  $9 \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$ , то в области МУГ ее величина возрастает до  $3 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$ .

Можно предположить, что на слабо разориентированных блоках – МУГ должно существовать торможение дислокаций, переползающих в поле градиента температур. В то же время такое торможение не может быть абсолютным – какая-то часть дислокаций «просочится» через границу. В целом существует тенденция к «переползанию» дислокаций по градиенту. Но МУГ всегда являлись энергетическими барьерами, концентрирующими на себе «переползающие» дислокации [1; 2].

МУГ являются одним из видов трехмерных дефектов, появляющихся при выращивании монокристаллов из расплава в результате пирамидального роста (т.е. пирамидального строения монокристаллов). Для инфракрасной оптики требуются монокристаллы больших диаметров (100–300 мм и более). Поэтому при всех технологических предосторожностях избавиться от МУГ при современном уровне техники трудно. Теория требует отклонений температуры на фронте кристаллизации диаметром 300 мм порядка  $0,1 \text{ K}\cdot\text{см}^{-1}$ . Однако при попытках реализации этого требования возникает другая трудность – скорость разрастания монокристалла уменьшается в сотни раз.

Наибольшие технологические трудности связаны с рассеянием лучистой (ИК-диапазон дальних волн, равный 6–15 мкм) энергии в объеме монокристалла [3]. Несмотря на то, что пирамиды роста  $\langle 1\bar{1}\bar{1} \rangle$  связаны с одной гранью, их рост от грани пирамид роста  $\langle 11\bar{1} \rangle$  во встречных направлениях создает некоторую разориентацию. Таким образом, пирамиды  $\langle 1\bar{1}\bar{1} \rangle$  могут состоять из двух блоков с некоторой разориентацией. В этом случае неизбежно появление дополнительных дислокаций, а блоки образуют между собой некоторый угол. Область контакта блоков с повышенным количеством параллельных дислокаций и является малоугловой границей. Электромагнитное излучение в диапазоне длин волн 6–15 мкм в оптической детали, изготовленной из поликристалла, обязательно «находит» серию препятствий с характеристическими размерами  $\lambda/2$ , что и приводит к увеличению поглощения и рассеяния энергии. В то же время ни модулированная дислокационная решетка, ни малоугловые границы в монокристаллах не вносят существенных вкладов в эти процессы. Первые несоизмеримы с параметром  $\lambda/2$ . Дислокационная трубка в предельном случае распространяет свое влияние на несколько постоянных решетки, т.е. на единицы нанометров. МУГ тоже состоят из отдельных дислокаций, расстояния между которыми находятся на уровне 15–25 мкм. Очевидно, что единичные МУГ не являются препятствием для ИК излучения (во всяком случае, в дальнем диапазоне). По существу МУГ представляет собой две или три дислокационные стенки, состоящие из отдельных дислокаций, расположенных на расстояниях друг от друга порядка 10–30 мкм (в остальном поле монокристалла расстояния между дислокациями – 60–70 мкм). Итак, ни единичные дислокации, ни МУГ для ИК излучения в дальней области не представляют реальных препятствий. Какие-то эффекты могли бы возникнуть в очень далекой области с длинами волн более 15 мкм, но германий в этой области не является прозрачным и соответственно не применяется.

Работа выполнена в соответствии с АВПЦ «Развитие научного потенциала высшей школы (2006-2008 гг.)»

**Список литературы**

1. Доброхотов Э.В. Диффузия в дислокационном германии и модель «жидкого» ядра дислокации //ФТТ. 2005. Т. 47. Вып.12. С.2166–2169.
2. Хименко М.В., Новиков Н.Н. Подвижность дислокаций в бездислокационном германии при низких напряжениях //Неорг. мат. 1975. Т. 11, №6. С. 995–999.
3. Каплунов И.А., Смирнов Ю.М., Долматов А.Б., Колесников А.И. Монокристаллы германия для инфракрасной техники: выращивание, дефекты структуры и оптические характеристики //Перспективные материалы. 2003. № 4. С. 35–41.