УДК 538.9

ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКОГО РАДИУСА ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ В КРЕМНИИ И ГЕРМАНИИ С УЧЕТОМ ЭНЕРГИИ ДЕФЕКТА УПАКОВКИ

Мозжерин А.В.

ФГАОУ ВПО «Сибирский федеральный университет», Красноярск, e-mail: Amozzherin@sfu-kras.ru

Проведена оценка критического радиуса дислокационных петель в монокристаллах кремния и германия с учетом энергии дефекта упаковки (ЭДУ), определенной с использованием методов просвечивающей электронной микроскопии. После идентификации дефектов в монокристаллах производился расчет ЭДУ в кремнии и германии по ширине полоски дефекта упаковки. Полученные значения показали зависимость плотности дефектов от ЭДУ в данных материалах. Также было установлено, что дефекты (главным образом, дислокационные петли) следуют тенденции к резкому сокращению в размерах после некоторого предела. Чтобы установить критические радиусы дислокационных петель, применялась модель частичных дислокационных петель в двух случаях: классическом (с учетом энергий дефекта упаковки дислокационной петли и упругой энергии дислокационной линии) и с учетом формирования частичных дислокаций Шокли. Теоретический расчет критического радиуса в кремнии и германии показал хорошую согласованность с экспериментальными результатами. А в случае с учетом классической модели с частичными дислокациями Шокли установлена прямая зависимость размеров и плотности дислокационных петель от энергии дефекта упаковки.

Ключевые слова: просвечивающая электронная микроскопия, дислокационная петля, критический радиус дислокационной петли, энергия дефекта упаковки

EVALUATION OF THE CRITICAL RADIUS OF DISLOCATION LOOPS IN SILICON AND GERMANIUM BASED STACKING FAULT ENERGY

Mozzherin A.V.

Siberian Federal University, Krasnoyarsk, e-mail: Amozzherin@sfu-kras.ru

The estimation of the critical radius of dislocation loops in single crystals of silicon and germanium produced in the Krasnoyarsk region in view of stacking fault energy (SFE), defined using the methods of transmission electron microscopy. After the identification of defects in single crystals used for calculating the SFE in silicon and germanium, the width of the strip of stacking fault. The values obtained showed the dependence defect density of the SFE in these materials. It was also found that the defects (mainly dislocation loops) follow the trend to a drastic reduction in size after a certain limit. To establish the critical radius of dislocation loops used unfaulting model of dislocation loops in two cases, the classical (including the stacking fault energy of the dislocation loops and the elastic energy of the dislocation line) and taking into account the formation of Shockley partial dislocations. Theoretical calculation of the critical radius in silicon and germanium showed good agreement with experimental results. And in the case with the classical model of Shockley partial dislocations a direct correlation between size and density of dislocation loops from the stacking fault energy.

Keywords: transmission electron microscopy, dislocation loop, the critical radius of the dislocation loops, stacking fault energy

Знание закономерностей дефектообразования в полупроводниковых материалах типа кремния и германия имеет исключительное значение, так как они являются основными материалами современной полупроводниковой электроники, солнечной энергетики и космической техники.

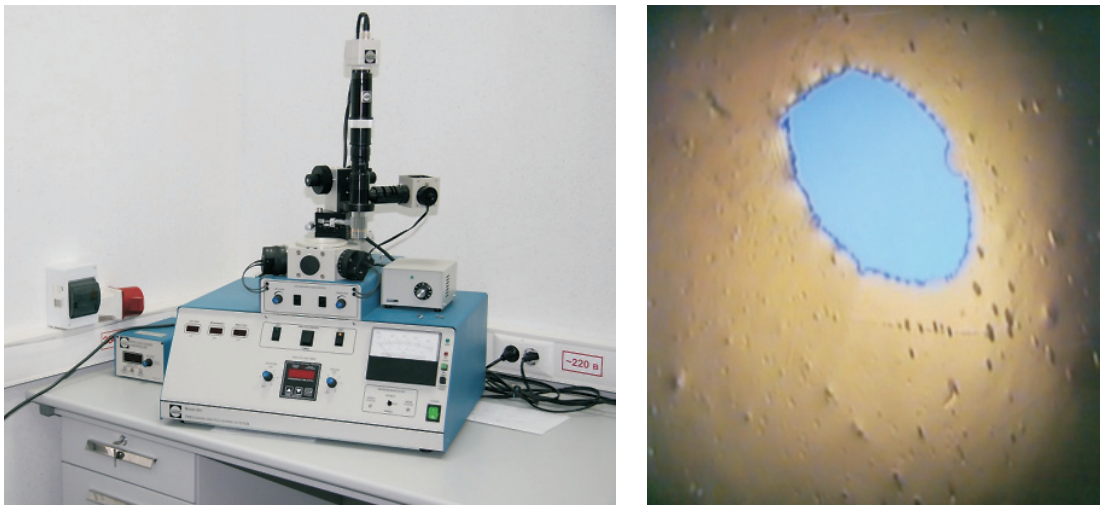
Процессы дефектообразования в кремнии и германии хорошо известны. Большое количество работ описывают причины, особенности и критерии формирования дефектов в этих материалах. Однако существенно меньше работ, описывающих зависимость образования дефектов от энергии дефекта упаковки (ЭДУ). Энергия дефекта упаковки – качественная характеристика любого полупроводникового материала. Она показывает необходимые условия для образования структурных дефектов (главным образом, линейных и объёмных). Определение ЭДУ в кремнии и германии позволяет не только установить дефектостойкость данных материалов, но и определить предельную плотность дефектов и произвести расчет ряда дополнительных параметров, например, критического радиуса дислокационных петель,что позволит более эффективно использовать данные материалы в современных наносистемах.

Целью исследования явилось установление закономерности между энергией дефекта упаковки и критическими радиусами дислокационных петель в кремнии и германии.

Материал и методы исследования

Исследуются монокристаллы кремния и германия, выращенные в Красноярском крае. Для выполнения цели исследования образцы изучались методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), главной целью которых являлось обнаружение и анализ структурных дефектов в данных материалах, а также проведение дополнительных испытаний, необходимых для дальнейшего вычисления ЭДУ материалов. При помощи просвечивающего электронного микроскопа JEOL JEM 2100 идентифицировались структурные дефекты в образцах кремния и германия, в дальнейшем была уста-

новлена их плотность. Были вычислены параметры дефектов и их характеристики. Предварительно образцы тщательно подготавливались для электронно-микроскопических исследований с применением современных методов пробоподготовки. Последний этап включал в себя ионное травление аргоном при оптимальных условиях для кремния и германия (рис. 1), что исключило возможность возникновения в материалах дополнительных дефектов, а также внесение примеси. Непосредственное исследование в ПЭМ JEOL JEM 2100, оснащенного рядом устройств, позволило определить именно структурные дефекты, отделив от них экстинкционные контуры и прочие артефакты [4].



а б

Рис. 1. Ионное травление образцов:
а – установка Precision Ion Polishing System (PIPS), Gatan; б – образец после ионного травления

Полученные результаты позволили вычислить ЭДУ в материалах по методу определения ширины полосок дефекта упаковки. А в дальнейшем вычислить критический радиус дислокационных петель с применением классической модели частичных дислокационных петель в двух случаях: классическом (с учетом энергий дефекта упаковки дислокационной петли и упругой энергии дислокационной линии) и с учетом формирования частичных дислокаций Шокли.

Результаты исследования и их обсуждение

Исследования на просвечивающем электронном микроскопе показали, что образцы кремния и германия содержат незначительное количество структурных дефектов: дислокаций, дислокационных петель и дефектов упаковки (рис. 2, 3). Плотность дефектов составила 10^4–10^5 см^2 для кремния и 10^4 см^2 – для германия.

ЭДУ вычислялась по методу определения ширины полоски дефекта упаковки [1, 3], т.е. по расстоянию, на которое разбегаются частичные дислокации. Ширина полоски вычисляется по формуле:

$$d = d_0\left(1-\frac{2\nu}{2-\nu}\cos 2\phi\right), \qquad (1)$$

где

$$d_0 = \frac{\mu b^2}{8\pi\gamma}\frac{2-\nu}{1-\nu}, \qquad (2)$$

отсюда

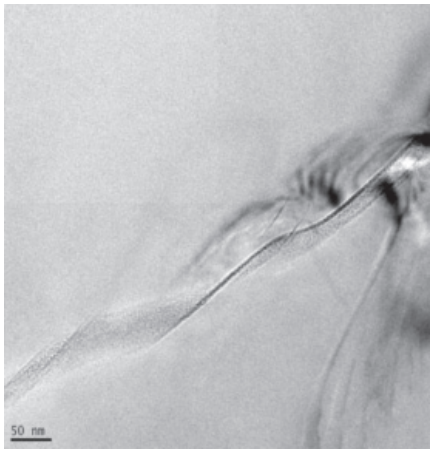
$$\gamma = \frac{\mu b^2\left(2-\nu\right)}{8\pi d_0\left(1-\nu\right)}, \qquad (3)$$

где ν – коэффициент Пуассона; φ – угол между полным вектором Бюргерса и направлением полоски; b – вектор Бюргерса; γ – ЭДУ; μ – модуль сдвига.

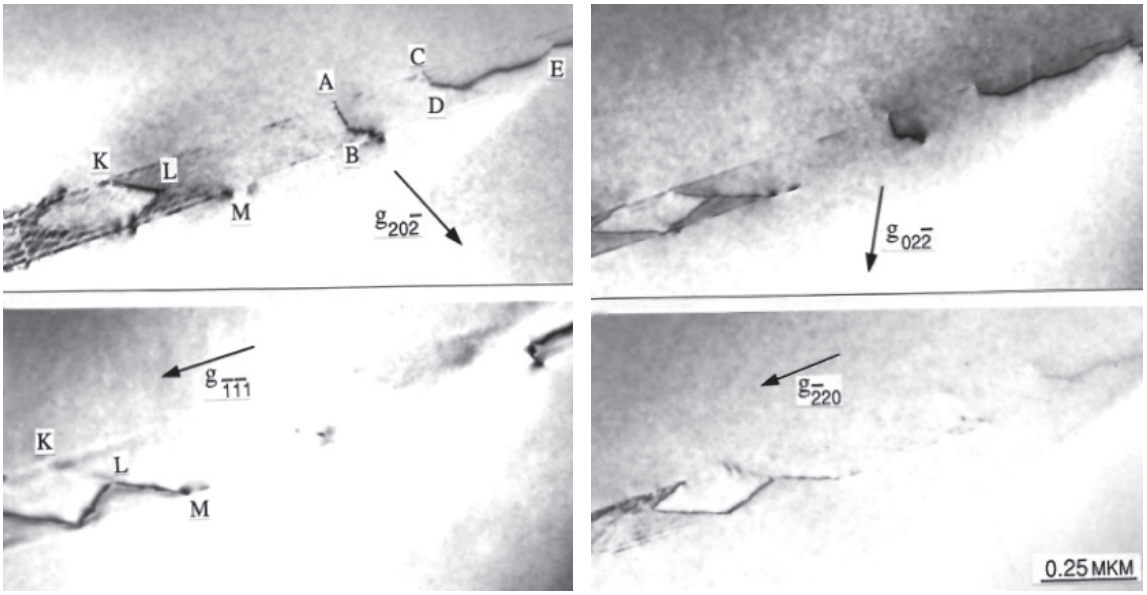
Вычисленное значение энергии дефекта упаковки составило $5\cdot10^{-2}$ и $9\cdot10^{-2}$ Дж/м^2 для кремния и германия соответственно. Полученные данные по ЭДУ свидетельствуют о том, что монокристаллический германий имеет более высокую энергию дефекта упаковки, чем монокристаллический кремний, а значит, он более стоек к образованию дефектов. Это подтверждается экспериментально: плотность дефектов в германии существенно меньше, чем в кремнии.

Известно, что плотность и размеры дислокационных петель напрямую связаны с энергией дефекта упаковки [2–3], так как один из вариантов образования дислокационных петель происходит при наличии частичных дислокаций, замыкающихся сами на себя. Как показали исследования на просвечивающем электронном микроскопе, эти дислокации были дислокациями Франка. Особое внимание было обращено на радиусы дислокаций Франка, так как пред-

полагается, что они связаны со значением ЭДУ в материале. Вычислив значение ЭДУ, теперь возможно рассчитать критический радиус дислокационных петель в кремнии и германии. Стоит отметить, что критический радиус дислокационной петли – та важная характеристика, которая показывает те точки, после которых происходят качественные и количественные изменения дефектной сети материала.



а



б

Рис. 2. Структурные дефекты в кремнии:
а – дислокация; б – дефект упаковки: AB, CD – винтовые дислокации
(вектор Бюргерса b параллелен линии дислокации l; см рис. 4 а и г. На г исчезает дислокация при (gb) = 0, где g – вектор дифракции), DE – краевая, KL – смешанная дислокация

Для вычисления критического радиуса дислокационной петли (r_{crit}) нами используется классическая модель описания энергий процесса образования петель Франка. Согласно ей общая энергия образования дислокационной петли ($E_{l,perfect}$) включает в себя энергию дефекта упаковки дислокационной петли (E_{SF}) и упругую энергию дислокационной линии ($E_{l,Frank}$) (1) [6]. Однако энергия $E_{l,perfect}$ еще может быть выражена как сумма энергий двух петель с вектором Бюргерса $b = b_{in} + b_{out}$.

$$E_{l,perfect} = E_{SF} + E_{l,Frank}, \quad (4)$$

где

$$E_{SF} = \pi r^2 \gamma; \quad (5)$$

$$E_{l,Frank} = 2\pi r \frac{\mu b_{Frank}^2}{4\pi(1-\upsilon)}\left[\ln\left(\frac{8\alpha r}{b_{Frank}}\right) - 1\right]; \quad (6)$$

$$E_{l,perfect} = 2\pi r \frac{\mu b_{Frank}^2}{4\pi(1-\upsilon)}\left[\ln\left(\frac{8\alpha r}{b_{out}}\right)-1\right]+ \\ +2\pi r \frac{2-\upsilon}{2(1-\upsilon)}\frac{\mu b_{in}^2}{4\pi}\left[\ln\left(\frac{8\alpha r}{b_{in}}\right)-2\right], \quad (7)$$

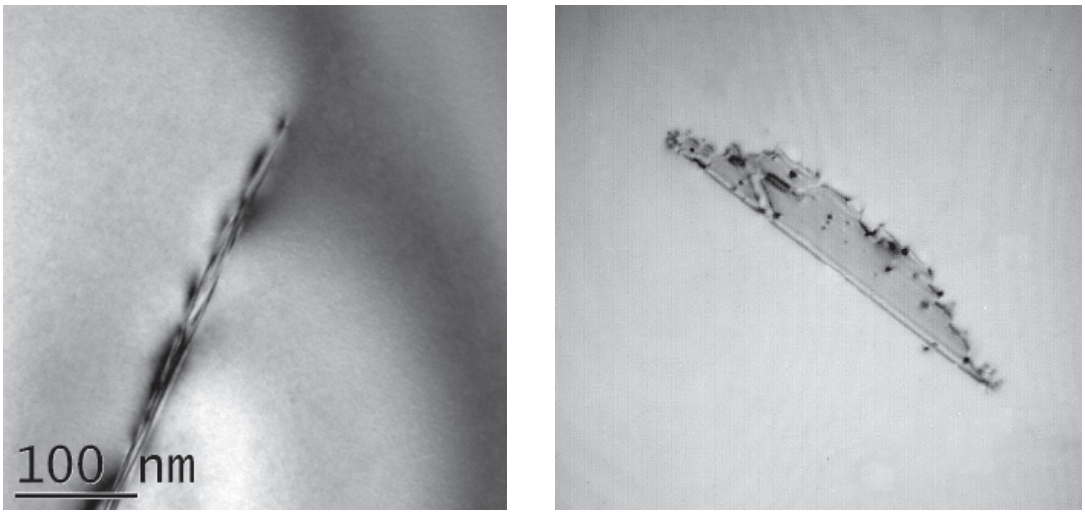
где r – радиус дислокационной петли; μ – модуль сдвига; υ – коэффициент Пуассона; α – фактор ядра дислокации; b_{Frank} – модуль вектора Бюргерса дислокационной петли Франка. В случае образцов кремния и германия (рис. 2–3) получается:

$$b_{Frank} = b_{out} = \frac{a}{\sqrt{3}} \text{ и } b_{in} = \frac{a}{\sqrt{6}}.$$

Таким образом, из (4–7) получаем связь между критическим радиусом (r_{crit}) и энергией дефекта упаковки (γ) как:

$$\gamma = \frac{\mu a^2}{24\pi r_{crit}}\frac{2+\upsilon}{(1-\upsilon)}\left[\ln\left(\sqrt{6}\frac{\alpha r_{crit}}{a}\right)\right]. \quad (8)$$

Решив трансцендентное уравнение, получим значения r_{crit} (таблица).



а б

Рис. 3. Структурные дефекты в германии:
а – дислокация; б – дефект упаковки

Численные значения ЭДУ и r_{crit} кремния и германия

Материал	ЭДУ, мДж/м^2	r_{crit} (классическая модель), нм	r_{crit} (с учетом частичных дислокаций Шокли), м
Si	55	98,8	18,0
Ge	90	55	9,9

Однако классическая модель описания энергий процесса образования частичных дислокационных петель имеет ряд недостатков, в частности, в ней не учитывается, что при этом процессе образование вакансионной петли Франка происходит путем формирования частичных дислокаций Шокли, что является наиболее энергетически выгодным. В этом случае формула (4) приобретает вид:

$$E_{l,perfect} = E_{SF} + E_{l,Frank} + 2E_{Shockley}, \quad (9)$$

где

$$E_{Shockley} = 2\pi r \frac{\mu b_{Shockley}^2}{4\pi}\left[\cos(\beta)^2 - \frac{\sin(\beta)^2}{1-\upsilon}\right]\ln\left(\frac{\alpha r}{b_{Shockley}}\right), \quad (10)$$

где β – угол между вектором Бюргерса и дислокационной линией сегмента Шокли, в нашем случае – $\beta = \pi/6$, $b_{Shockley} = \frac{a}{\sqrt{6}}$.

Стоит обратить внимание, что частичные дислокации Шокли считаются как прямые отрезки, а не как петли, хотя общая линия двух дислокаций образует петлю. Для проверки данной модели был вычислен крити-

ческий радиус, и полученные результаты сравнивались с данными, полученными с помощью классической модели.

Из уравнения (9) можно получить выражение для γ процесса образования внешней петли:

$$\gamma = \frac{\mu a^2}{4800\pi r_{crit}(1-\upsilon)}\left[400\upsilon \ln\left(\frac{\alpha r_{crit}}{a}\right) + 32 + 343\upsilon\right]. \quad (11)$$

Численные результаты приводятся в таблице.

Заключение

В работе были проведены электронно-микроскопические исследования монокристаллов кремния и германия. Было определено значение энергии дефекта упаковки: $5\cdot10^{-2}$ и $9\cdot10^{-2}$ Дж/м^2 для кремния и германия соответственно. Подтверждена зависимость плотности дефектов от ЭДУ: в кремнии, где ЭДУ несколько ниже, чем в германии, наблюдалось существенно более высокая плотность дефектов. Также, используя модель описания энергий процесса образования частичных дислокационных петель, были вычислены критические радиусы дислокационных петель данных материалов. В классическом случае (учитывая только энергию петель Франка) и с учетом энергии, вносимой частичными дислокациями Шокли. Установлено, что во втором случае полученные критические радиусы дислокационных петель достаточно точны, что подтверждается сравнением результатов с данными ряда работ [3, 5]. А также подтверждено предположение о влияние ЭДУ на $r_{crit,}$ согласно данным таблицы.

Экспериментальная работа была проведена при поддержке гранта ФЦП РФ НК-550Р_2.

Список литературы

1. Амелинкс С. Методы прямого наблюдения дислокаций: уч. изд. – М.: Изд-во «Мир», 1968. – 440 с.

2. Логинов Ю.Ю., Браун П.Д., Дьюроуз Кен. Закономерности образования структурных дефектов в полупроводниках А2В6: науч. изд. – М.: Логос, 2003. – 304 с.

3. Мозжерин А.В. Изучение энергии дефекта упаковки в кремнии методом электронной микроскопии // Естественные и технические науки. – 2011. – № 3. – С. 50–53.

4. Мозжерин А.В., Логинов Ю.Ю. Электронно-микроскопические исследования процессов дефектообразования в основных полупроводниковых материалах: сб. науч. тр. / Юбилейная X Всерос. Школа-семинар по пробл. физики конденсир. состоян в-ва, Екатеринбург, 9–15 ноября 2009 г.: ИФМ УрО РАН. – 2009. – С. 249–250.

5. Glas Frank. A simple calculation of energy changes upon stacking fault formation or local crystalline phase transition in semiconductors // Journal of Applied Physics. – 2008. – Vol. 104, 093520. –P. 1–6.

6. Herrera M., González D., Lozano J.G., García R., Hopkinson M., Liu H.Y., Gutierrez M., Navaretti P. Unfaulting of dislocation loops in the GaInNAs alloy: An estimation of the stacking fault energy // Applied Physics Letters. – 2005. – Vol. 98, 023521. – P. 1–7.

References

1. Amelinks, S. Methods of direct observation of dislocations: text ed. Moscow: Publishing House of Peace, 1968. pp. 440.

2. Loginov Y., Brown Paul D., Dyurouz Ken. Regularities of formation of structural defects in semiconductors A2B6: Moscow: Logos, 2003. pp. 304.

3. Mozzherin, Study of stacking fault energy in silicon by electron microscopy // Natural and Technical Sciences. 2011. no. 3. pp. 50–53.

4. Mozzherin A., Loginov Y. Electron microscope studies of defects in the basic processes of semiconductor materials / X Anniversary All-Russia. Workshop on probl. physics of condensed. status substance, Ekaterinburg, November 9–15, 2009: Institute of Metal Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 2009. pp. 249–250.

5. Glas Frank. A simple calculation of energy changes upon stacking fault formation or local crystalline phase transition in semiconductors // Journal of Applied Physics. 2008. Vol. 104, 093520. pp. 1–6.

6.Herrera M., González D., Lozano J.G., García R., Hopkinson M., Liu H.Y., Gutierrez M., Navaretti P. Unfaulting of dislocation loops in the GaInNAs alloy: An estimation of the stacking fault energy // Applied Physics Letters. 2005. Vol. 98, 023521. pp. 1–7.

Рецензенты:

Логинов Ю.Ю., д.ф.-м.н., профессор, Сибирский государственный аэрокосмический университет им. ак. М.Ф. Решетнева, г. Красноярск;

Попов А.М., д.ф.-м.н., профессор, Сибирский государственный аэрокосмический университет им. ак. М.Ф. Решетнева, г. Красноярск.

Работа поступила в редакцию 26.10.2012.