

УДК 548.571

ОЦЕНКА СТЕПЕНИ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПО КРИТИЧЕСКОМУ РАДИУСУ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ

¹Логинов Ю.Ю., ¹Мозжерин А.В., ²Брильков А.В.

¹ФГБОУ ВПО «Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М.Ф. Решетнева», Красноярск, e-mail: loginov@sibsau.ru;

²ФГАОУ ВПО «Сибирский федеральный университет», Красноярск, e-mail: abrilkov@sfu-kras.ru

Проведена оценка критического радиуса дислокационных петель (ДП) в монокристаллах полупроводников CdTe, ZnTe, ZnSe, ZnS, CdS, GaAs, Si и Ge с учетом величины энергии дефекта упаковки (ЭДУ). Распределение ДП по размерам изучали с помощью просвечивающего электронного микроскопа. Экспериментальные результаты сравнивались с теоретическими расчетами критических радиусов перехода частичных дислокационных петель в полные с учетом энергии образования дислокационных петель и энергии дефекта упаковки материалов. Показано, что критический радиус зависит от энергии дефекта упаковки и является важной характеристикой при анализе процессов дефектообразования в полупроводниках. Чем больше критический радиус ДП, тем менее стоек полупроводник к дефектообразованию и в нем происходит больше структурных нарушений при идентичных режимах воздействия (обработки). При этом размеры и плотность структурных дефектов в материалах при аналогичных условиях обработки зависят от величины энергии дефекта упаковки.

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

ASSESSMENT OF THE DEGREE OF DEFECT FORMATION IN A SEMICONDUCTOR ON THE CRITICAL RADIUS OF THE DISLOCATION LOOPS

¹Loginov Y.Y., ¹Mozzherin A.V., ²Brilkov A.V.

¹Siberian State Aerospace University, Krasnoyarsk, e-mail: loginov@sibsau.ru;

²Siberian Federal University, Krasnoyarsk, e-mail: abrilkov@sfu-kras.ru

The critical radius of the dislocation loops (DL) in single crystals of semiconductors CdTe, ZnTe, ZnSe, ZnS, CdS, GaAs, Si and Ge estimated taking into account the value of the stacking fault energy (SFE). Dislocation loops size distribution was studied using transmission electron microscopy. The experimental results were compared with theoretical calculations of the critical radius of partial dislocation loop transition in full DL with the energy of dislocation loops formation and stacking fault energy of materials. It is shown that the critical radius depends on the stacking fault energy is an important feature in the analysis of defect formation processes in semiconductors. The more critical radius of the DL, the less resistant to the semiconductor defect formation and there is more structural imperfections in identical conditions of exposure (treatment). The dimensions and density of structural defects in materials with similar processing conditions depend on the stacking fault energy.

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

Полупроводниковые материалы широко используются в микроэлектронике и солнечной энергетике. При облучении или термообработках в полупроводниках, как правило, образуется большое количество дислокационных петель, размеры которых весьма различны. При достижении определенного значения радиуса дислокационной петли, который носит название «критический» (r_{crit}), происходят резкие изменения в плотности дислокационных петель с радиусами больше, чем r_{crit} . Резкий переход в плотности петлей при увеличении их радиуса $r > r_{crit}$ авторы [6] связывают с переходом частичных дислокаций в полные. Критический радиус дислокационной петли можно рассматривать как важную характеристику, которая показывает те точки, после которых происходят качественные и количественные изменения дефектной сети материала. Поскольку энергия образования

дислокационных петель связана с энергией дефекта упаковки материала (ЭДУ), то параметр ЭДУ является важным при анализе процессов дефектообразования и «дефектостойкости». Известно, что с уменьшением ЭДУ происходит увеличение структурных нарушений в металлах [3, 5]. Увеличение концентрации легирующей примеси в кремнии сопровождается снижением энергии дефекта упаковки, что связано с повышением интенсивности формирования примесных выделений [7]. При исследовании полупроводников A_2B_6 установлено, что интенсивность образования структурных дефектов при облучении электронами уменьшается в последовательности от $ZnS \rightarrow ZnSe \approx CdS \rightarrow CdTe \approx HgTe \rightarrow ZnTe$ и далее к $GaAs \approx Si$, что коррелирует с ростом значения ЭДУ этих материалов [4].

В данной работе методом просвечивающей электронной микроскопии исследу-

довали монокристаллы полупроводников CdTe, ZnTe, ZnSe, ZnS, CdS, GaAs, Si и Ge, содержащие дислокационные петли, образовавшиеся в результате различных термообработок и (или) облучении электронами и ионами при условиях, подробно описанных в [4]. Монокристаллы полупроводников A_2B_6 были выращены из газовой фазы в запаянной трубке, а GaAs, Si и Ge были выращены методом Чохральского. Электронно-микроскопические исследования проводили на приборах JEM-100 CX, JEM-4000 EXII и JEM-2100. Образцы

для исследования в ПЭМ приготавливали стандартным методом, сначала механически утончая, используя устройство Gatan Dimple Grinder, а затем ионным травлением на установке Precision Ion Polishing System (PIPS), Gatan. Радиус r_{crit} определяли по методу, предложенному в [6], из гистограмм распределения дислокационных петель по размерам.

На рис. 1 показаны характерные дислокационные петли, образовавшиеся в CdTe в результате ионного травления тонкой фольги ионами Ar^+ с энергией 5 keV в течение 15 min.

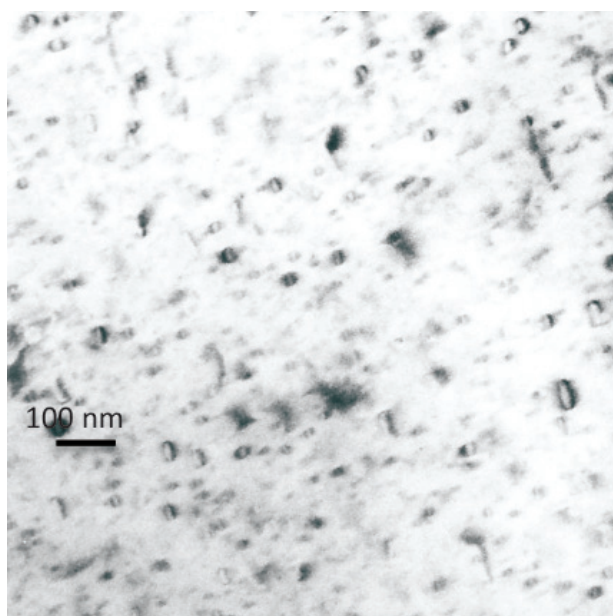


Рис. 1. Образование дислокационных петель в CdTe в результате ионного травления тонкой фольги ионами Ar^+ с энергией 5 keV в течение 15 min. ТЕМ 220BF изображение

Размеры петель лежат в интервале от 15 до 65 nm при плотности $2,5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Распределение дислокационных петель по размерам показано на рис. 2. Критический радиус в данном случае можно оценить в соответствии с [6] как $48 \pm 3 \text{ nm}$. В этой области на рисунке наблюдается резкий скачок в плотности петель (показано стрелкой).

Известно, что процесс образования полной дислокационной петли с вектором Бюргерса $\frac{a}{2} \langle 110 \rangle$ в ГЦК кристаллах можно представить как результат взаимодействия частичных дислокаций Шокли и Франка с векторами Бюргерса $\frac{a}{6} \langle 112 \rangle$ и $\frac{a}{3} \langle 111 \rangle$.

Например,

$$\frac{a}{6} [2\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6} [\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{3} [111] \rightarrow \frac{a}{2} [110]. \quad (1)$$

Согласно классической модели описания энергий процесса образования дис-

локационных петель, 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].

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

где $E_{SF} = \pi r^2 \gamma;$ (3)

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

$$E_{l, perfect} = 2\pi r \frac{\mu b_{Frank}^2}{4\pi(1-\nu)} \left[\ln \left(\frac{8\alpha r}{b_{Frank}} \right) - 1 \right] + 2\pi r \frac{2-\nu}{2(1-\nu)} \frac{\mu b_m^2}{4\pi} \left[\ln \left(\frac{8\alpha r}{b_{Shockley}} \right) - 2 \right]; \quad (5)$$

r – радиус дислокационной петли; μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона;

α – фактор ядра дислокации; b_{Frank} – модуль вектора Бюргера дислокационной петли Франка; $b_{Shockley}$ – модуль вектора Бюргера дислокационной петли Шокли. В стан-

дартном случае получается $b_{Frank} = \frac{a}{\sqrt{3}}$ и $b_{Shockley} = \frac{a}{\sqrt{6}}$. Здесь a – параметр решетки.

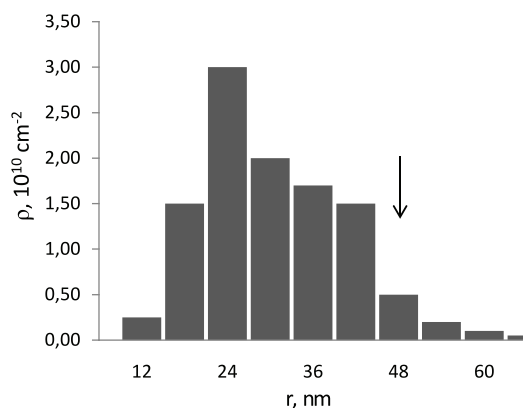


Рис. 2. Зависимость плотности (ρ) дислокационных петель от размеров (r)

Таким образом, из (2)–(5) получаем связь между критическим радиусом r_{crit} и энергией дефекта упаковки γ как:

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

В работе [6] проведена оценка ЭДУ в GaInNAs с помощью классической модели образования дислокационных петель

и показано, что она не в полной мере описывает экспериментальные результаты. Более энергетически выгодным является процесс образования петель, учитывающий скольжение двух частичных дислокаций Шокли в разных плоскостях. В этом случае формула (2) приобретает вид [6]:

$$E_{l, perfect} = E_{SF} + E_{l, Frank} + 2E_{Shockley} \quad (7)$$

где

$$E_{Shockley} = 2\pi r \frac{\mu b_{Shockley}^2}{4\pi} \left[\cos(\beta)^2 - \frac{\sin(\beta)^2}{1 - \nu} \right] \ln \left(\frac{\alpha r}{b_{Shockley}} \right); \quad (8)$$

здесь β – угол между вектором Бюргера и дислокационной линией сегмента Шокли, равный $\pi/6$.

С учетом уравнений (7) и (8) выражение для γ можно записать как

$$\gamma = \frac{\mu a^2}{4800\pi r_{crit} (1 - \nu)} \left[400\nu \ln \left(\frac{\alpha r_{crit}}{a} \right) + 32 + 343\nu \right]. \quad (9)$$

Зная значения ЭДУ для полупроводниковых материалов, из уравнения (9) можно рассчитать критические радиусы дислокационных петель для различных полупроводников.

Для решения полученного трансцендентного уравнения использовали программный пакет «Maple».

Значения r_{crit} для ряда полупроводников представлены в таблице.

Приведенные в таблице значения r_{crit} сравнивались с экспериментальными данными, полученными в результате электронно-микроскопических исследований полупроводниковых материалов. Установлено, что рассчитанные по классической модели r_{crit} не соответствуют экспериментальным значениям и завышены на порядок величины. Значения r_{crit} рассчитанные по формуле

(9) находятся в хорошем соответствии с экспериментальными значениями (последний столбец таблицы).

Из таблицы также видно, что критический радиус дислокационных петель в полупроводниках напрямую связан с энергией дефекта упаковки материала и уменьшается с ростом ЭДУ. То есть чем выше ЭДУ в материале, тем меньше значение «критического» радиуса и тем более низкая вероятность обнаружить крупные дислокационные петли. Это хорошо согласуется с электронно-микроскопическими исследованиями [4]. В частности, из экспериментов с использованием просвечивающего электронного микроскопа следует, что сульфид цинка, имеющий самую низкую ЭДУ среди исследованных полупроводников, имеет самую

высокую плотность и разнообразие структурных дефектов, а размеры дислокационных петель могут достигать значений, на

несколько порядков превышающих аналогичные размеры в других анализируемых материалах.

Значения r_{crit} для ряда полупроводников

Материал	Параметр решетки, nm	Коэффициент Пуассона [2, 9, 10]	Модуль сдвига, GPa [2, 9, 10]	ЭДУ, мДж/м ² [1,4,7,8]	r_{crit} , nm	
					Класс. модель	Класс. модель с уч. дисл. Шокли
Ge	0,566	0,26	31,7	90	~25,1	~ 3,8
Si	0,543	0,27	42,9	50-60	46,5–58,1	7,9–10,1
GaAs	0,565	0,31	32,9	55 ± 5	40,1–50,2	7,8–9,9
ZnTe	0,609	0,36	17,3	16 ± 4	92,9–171	22,5–42,5
CdTe	0,648	0,41	9,2	11 ± 1,9	95,5–145	26,3–41
ZnSe	0,566	0,28	27,5	11,4 ± 1,3	197–257	38,4–51
CdS	0,527	0,4	16,1	7,8 ± 1,9	162–290	44,9–80,2
ZnS	0,541	0,38	21,7	5–6	405–500	110–136
		0,28	26,3			82–101

Таким образом, показано, что имеется корреляция между критическим радиусом ДП и значением ЭДУ. Критический радиус ДП уменьшается с ростом ЭДУ. Поскольку ЭДУ – универсальная величина, указывающая на стойкость материала к дефектообразованию [3–5, 7], то значение «критического» радиуса дислокационной петли можно рассматривать как меру дефектостойкости полупроводников. Чем больше критический радиус ДП, тем менее стоек полупроводник к дефектообразованию и в нем происходит больше структурных нарушений при идентичных режимах воздействия (обработки). При этом размеры и плотность структурных дефектов в материалах при аналогичных условиях обработки зависят от величины энергии дефекта упаковки.

Список литературы

1. Амелинск С. Методы прямого наблюдения дислокаций. – М.: МИР, 1968. – 440 с.
2. Горичок И.В. Энтальпия образования дефектов Шоттки в полупроводниках // ФТТ. – 2012. – Т. 54, № 3. – С. 1373–1376.
3. Воинов С.Н. К вопросу о роли энергии дефекта упаковки в изменении структуры и свойств металлов и сплавов в результате радиационного и термического воздействия / С.Н. Воинов, О.П. Максимкин // Вопросы атомной науки и техники / серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. – 2002. – № 3 (81). – С. 23–30.
4. Логинов Ю.Ю. Закономерности образования структурных дефектов в полупроводниках А2В6 / Ю.Ю. Логинов, П.Браун, К. Дьороуз. – М.: Логос, 2003. – 304 с.
5. Ebrahimi, F. Effect of stacking fault energy on plastic deformation of nanocrystalline face-centered cubic metals / F. Ebrahimi, Z. Ahmed, H. Li // Applied Physics Letters. – 2004. – Vol. 85, № 17. – P. 3749–3751.
6. Herrera M. Unfaulting of dislocation loops in the GaInNAs alloy: An estimation of the stacking fault energy / M. Herrera, D. González, J. G. Lozano, R. García, M. Hopkinson, H. Y. Liu, M. Gutierrez, P. Navaretti // J. Appl. Phys. – 2005. – Vol. 98, 023521. – P. 1–7.
7. Ohno Y. Interaction of dopant atoms with stacking faults in silicon crystals / Y. Ohno, T. Taishi, Y. Tokumoto, I. Yonenaga. // J. Appl. Phys. – 2010. – Vol. 108, 073514. – P. 1–4.
8. Takeuchi S. Stacking-fault energy of II-VI compounds / S. Takeuchi, K. Suzuki, K. Maeda, H. Iwanaga // Phil. Mag. A. – 1984. – Vol. 50, № 2. – P. 171–178.

9. Semiconductor NSM [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/> (дата обращения 01.07.2013).

10. Кристаллические материалы [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.elektrosteklo.ru/Crystals.htm> (дата обращения 01.07.2013).

References

1. Amelinks S. Direct methods of dislocation observation. Moscow: Mir, 1968. 440 p.
2. Gorichok I.V., Gorichok I.B. Enthalpy of Schottky-defects formation in semi conductors. Physics of the Solid State, 2012, Vol. 54, no 3, pp. 1373–1376.
3. Votinov S.N., Maksimkin O.P. The role of stacking fault energy to change the structure and properties of metals and alloys as a result of radiation and thermal effects. Series: Physics of Radiation Damage and Radiation Materials. 2002, no 3 (81), pp. 23–30.
4. Loginov Y.Y., Brown P., Durose K. The regularities of structural defect formation in semi conductors A2B6. Moscow: Logos, 2003, 304 p.
5. Ebrahimi, F., Ahmed Z., Li H. Effect of stacking fault energy on plastic deformation of nanocrystalline face-centered cubic metals. Applied Physics Letters, 2004, Vol. 85, no. 17, pp. 3749–3751.
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. J. Appl. Phys, 2005, Vol. 98, 023521, pp. 1–7.
7. Ohno Y., Taishi T., Tokumoto Y., Yonenaga I. Interaction of dopant atoms with stacking faults in silicon crystals. J. Appl. Phys., 2010, Vol. 108, 073514, pp. 1–4.
8. Takeuchi S., Suzuki K., Maeda K., Iwanaga H. Stacking-fault energy of II-VI compounds. Phil. Mag. A., 1984, Vol.50, no. 2, pp. 171–178.
9. Semiconductor NSM. – Available at: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/> (accessed 1 July 2013).
10. Crystalline materials. – Available at: <http://www.elektrosteklo.ru/Crystals.htm> (accessed 1 July 2013).

Рецензенты:

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

Мисюль С.В., д.ф.-м.н., профессор, Сибирский федеральный университет, г. Красноярск.
Работа поступила в редакцию 11.07.2013.