

ДИНАМИКА ПЕРЕГИБОВ НА ДИСЛОКАЦИЯХ В МОНОКРИСТАЛЛАХ SiGe

Ю. Л. Иунин^{a,}, В. И. Никитенко^a, В. И. Орлов^a, Д. В. Дьяченко-Деков^a,
Б. В. Петухов^b, Н. В. Абросимов^{a,**}, С. Н. Россоленко^a, В. Шредер^c*

^a *Институт физики твердого тела Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

^b *Институт кристаллографии Российской академии наук
117333, Москва, Россия*

^c *Институт роста кристаллов
12489, Берлин, Германия*

Поступила в редакцию 25 июня 2001 г.

Методом прерывистого импульсного нагружения получены зависимости среднего пробега индивидуальных дислокаций в монокристаллах сплава SiGe с разным содержанием Ge (0–5.5 ат.%) от длительности импульсов нагрузки и пауз между ними. Обнаружено их качественное изменение при увеличении содержания германия. Показано, что движение дислокаций в кристаллах SiGe при малых сдвиговых напряжениях характеризуется нелинейным дрейфом кинков и образованием суперкинков. Развита теория движения дислокации под действием прерывистого импульсного нагружения в условиях гетерогенной динамики кинков. В кристаллах SiGe, содержащих 0.96 ат.% Ge, обнаружены протяженные квазиодномерные дефекты, повторяющие форму части сегмента движущейся дислокации. Предложен механизм формирования таких дефектов как результат сброса сегментом дислокации части примесной атмосферы при преодолении локального препятствия.

PACS: 61.72.Bb, 61.72.Lk, 61.72.Ff, 61.72.Tt

1. ВВЕДЕНИЕ

Рельеф Пайерлса — периодическая зависимость энергии дислокации от ее положения в плоскости скольжения — является прямым следствием трансляционной симметрии кристаллической решетки. Наиболее ярко он проявляется в кристаллах с ковалентными связями (алмаз, Si, Ge и их сплавы). Принято считать, что движение дислокаций в рельефе Пайерлса происходит путем термофлуктуационного формирования пар перегибов (кинков) и их последующего расширения до концов дислокационного сегмента или до аннигиляции с кинками противоположного знака из смежных на линии дислокации

пар [1, 2]. Перегибы — это короткие сегменты дислокации, соединяющие отрезки дислокации, лежащие в смежных долинах рельефа. Пайерлсовский механизм движения дислокаций сейчас является общепризнанным для кристаллов с глубоким рельефом. Более того, недавно существование кинков было подтверждено прямыми наблюдениями в высокоразрешающем электронном микроскопе [3–5].

Анализ экспериментальных данных о динамике дислокаций и кинков в кремнии и германии [6, 7], имеющих идентичную кристаллическую структуру, показал, что даже в самых чистых полупроводниковых кристаллах выявляется ряд существенных расхождений с предсказаниями теории движения дислокации в идеальном рельефе Пайерлса [1, 2]. Было установлено, что несоответствия в кристаллах кремния, наблюдаемые в области малых сдвиговых напряжений, обусловлены процессом увлечения дис-

*E-mail: iunin@issp.ac.ru

**Адрес в настоящее время: Institut für Kristallzüchtung, Max-Born-Str. 2, 12489 Berlin, Germany.

локацией подвижных точечных дефектов и примесей [6, 8]. По достижении определенной критической концентрации точечных дефектов вблизи дислокации подвижность последней резко уменьшается вплоть до полной остановки (стартовые напряжения для движения дислокации). В слаболегированных кристаллах германия, где стартовые напряжения для движения дислокации не выявляются, расхождения с теорией движения дислокации в идеальном рельефе Пайерлса обусловлены взаимодействием дислокации с окружающими ее точечными дефектами и примесями, определяющими случайно распределенные вдоль дислокации барьеры для движения перегиба [7, 9].

Таким образом, процессы зарождения и движения дислокационных перегибов определяют подвижность дислокаций в полупроводниковых материалах. Однако динамика этих возбуждений топологической природы в системах со случайным беспорядком экспериментально изучена явно недостаточно. Особый интерес таким исследованиям придает возможность проявления в подобных системах аномальных режимов движения перегибов. Ранее было показано [10, 11] (см. также обзор [12]), что в присутствии значительного количества примесей возмущение кристаллической решетки может приводить к смене обычной динамики кинка на так называемый гетерогенный режим. Это явление носит общий характер и должно проявляться не только на дислокационных перегибах, но и на других топологических дефектах (двойниковые, доменные, межфазные границы и т. д.). Смена режима происходит, когда движущая кинк сила F становится меньше, чем некоторое критическое значение F_c , определяемое степенью беспорядка, созданного дефектами. Новый тип динамики характеризуется нелинейным дрейфом, когда смещение кинка со временем удовлетворяет уравнению

$$x \approx x_0 \left(\frac{t}{t_0} \right)^\delta, \quad \delta = \frac{F}{F_c} \leq 1, \quad (1)$$

где $x_0 = kT/F_c$, $t_0 = x_0^2/2D_k$, D_k — коэффициент диффузии кинка, k — постоянная Больцмана, T — температура.

В кристаллах сплава SiGe атомы Ge распределены случайным образом и могут рассматриваться как малоподвижная нейтральная примесь замещения в кристалле кремния, вызывающая, наряду с подвижными примесями, случайную модуляцию рельефа Пайерлса. Данная работа посвящена экспериментальному изучению влияния такой модуляции на

процессы формирования и движения дислокационных перегибов.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Монокристаллы сплава $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ($0 \leq y < 0.15$) диаметром до 42 мм были выращены по методу Чохральского в Институте роста кристаллов, Берлин (Германия) [13]. Слитки имели небольшой градиент концентрации германия вдоль направления оси роста [111], были слабо легированы фосфором или бором с концентрацией порядка 10^{15} см^{-3} и содержали примерно $6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ кислорода.

Образцы SiGe в форме прямоугольных призм с ориентацией ребер $[1\bar{1}0]$, $[11\bar{2}]$, $[111]$, размерами $35 \times 4 \times 1.5 \text{ мм}^3$ и концентраций Ge до 5.5 ат. % вырезались из части слитков, свободных от дислокаций, и механически и химически полировались. Концентрация германия измерялась по положению линии TO фонона [14].

Индивидуальные дислокационные полупетли вводились с помощью уколов алмазной пирамидкой широких граней (111) образца при комнатной температуре с последующим нагружением при температуре 873 К четырехпорным изгибом вокруг оси $[11\bar{2}]$. Введенные дислокации «разгонялись» до диаметра 200–220 мкм приведенным сдвиговым напряжением 30 МПа. Отметим, что в данной геометрии дислокационные полупетли зарождаются и скользят в плоскостях $(1\bar{1}1)$ и $(\bar{1}11)$, а сегменты, выходящие на поверхность (111) по одну сторону от уколов, могут иметь только шестидесятиградусную ориентацию (заведомо шестидесятиградусная сторона), а по другую — как шестидесятиградусную, так и винтовую ориентацию (смешанная сторона) [15].

Ранее в образцах SiGe были выявлены значительные стартовые напряжения для движения дислокаций σ_s [16], величина которых зависит от состояния дислокационной атмосферы точечных дефектов [17, 18]. Для воспроизводимости результатов необходимо иметь идентичные условия состояния атмосферы. С этой целью перед каждым нагружением дислокации «разгонялись» в течение 10–15 мин под действием касательных напряжений $\sigma = 30 \text{ МПа}$ при температуре $T = 873 \text{ К}$. После этого образец медленно охлаждался с печью и положения дислокаций выявлялись избирательным химическим травлением в травителе Сиртла $1\text{CrO}_3 + 2\text{H}_2\text{O} + 3\text{HF}$ [19]. Непосредственно же перед основным нагружением проводилось кратковременное (120 с) пред-

варительное нагружение сдвиговым напряжением 50 МПа, что позволяло существенно уменьшить величину стартовых напряжений и изучать динамику перегибов при малых напряжениях. Для выявления и исследования геометрии следов за дислокациями использовалось послойное удаление материала в полирующем растворе $7\text{HNO}_3 + 1\text{HF}$ и избирательное химическое травление.

Динамика перегибов на 60° -дислокациях изучалась методом прерывистого импульсного нагружения (ПИН) [6, 7], который основан на нагружении образца, содержащего индивидуальные дислокации, последовательностью импульсов напряжения σ_i . Продолжительность индивидуального импульса t_i сопоставима со средним временем смещения дислокации на один параметр кристаллической решетки $t_a = a/V_{st}$, где V_{st} — скорость стационарного движения дислокации при обычном статическом нагружении. Импульсы разделены паузами продолжительностью t_p , во время которых напряжение не прикладывается ($\sigma_p = 0$). В течение импульса нагрузки на дислокации в дополнение к равновесным перегибам формируются и распространяются новые пары перегибов. В паузе при снятии импульсной нагрузки они становятся неравновесными и коллапсируют к центрам зарождения под действием приложенного напряжения, взаимного притяжения пар, а также из-за взаимодействия дислокации и перегиба с точечными дефектами. Как будет показано в разд. 3.2, изменяя продолжительность импульсов и пауз и измеряя характеристики распределения дислокаций по длинам пробега, можно получить информацию о кинетике образования пар перегибов, их расширения и релаксации.

Образцы деформировались четырехпорным изгибом серий импульсов нагрузки от электромагнитного преобразователя с амплитудой касательных напряжений $\sigma_i = 15$ МПа. Полная длительность активного нагружения $\sum t_i$ поддерживалась неизменной и выбиралась равной времени статического нагружения, при котором дислокации смещались на расстояния 40–50 мкм. Длительность фронта импульсов нагрузки поддерживалась постоянной (4 мс). Температура измерялась терморпарой и поддерживалась постоянной с точностью ± 1 К. Для определения временных характеристик формирования пары кинков и их дрейфа измерялись зависимости среднего пробега 60° -дислокаций от длительности импульса $l(t_i)$ при $t_i = t_p$, а также от длительности паузы $l(t_p)$ при фиксированной длительности импульсов нагрузки.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Подвижность индивидуальных дислокаций и динамика кинков

На рис. 1 показаны зависимости скорости индивидуальных 60° -дислокаций от касательных напряжений в монокристаллах SiGe с различным содержанием германия. Видно, что в области высоких напряжений все три зависимости различаются слабо. Напротив, в области малых сдвиговых напряжений различия с изменением состава становятся существенными (рис. 1, штриховые линии).

Для изучения кинетики формирования перегибов на линии дислокации методом прерывистого импульсного нагружения были измерены зависимости среднего пробега дислокаций от длительности импульсов нагрузки для образцов Si и SiGe (рис. 2). Видно, что с увеличением длительности импульсов пробеги дислокаций растут как в Si, так и SiGe. Однако скорости этого увеличения существенно различаются. В кремнии наблюдается резкое нарастание пробега дислокаций при $t_i/t_a \approx 0.5$, подобно тому как это наблюдалось и в образцах кремния, выращенных методом зонной плавки [6] (светлые ромбики). Зависимость, полученная на образцах сплава SiGe существенно более пологая, т.е. средние пробеги дислокаций в образцах SiGe достигают значений порядка стационарного пробега при гораздо больших относительных длительностях им-

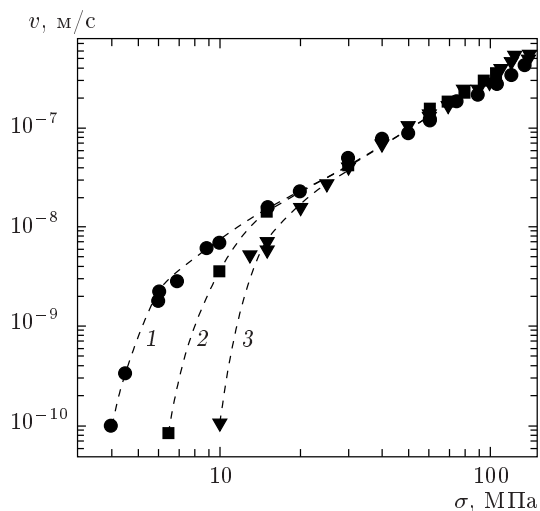


Рис. 1. Зависимости скорости индивидуальных 60° -дислокаций в кристаллах $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ от сдвигового напряжения; $y = 0.02$ (1), 0.033 (2), 0.055 (3), $T = 873$ К

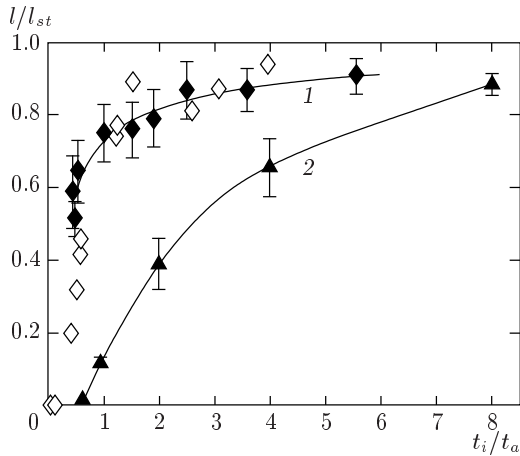


Рис. 2. Средние пробеги индивидуальных 60° -дислокаций под действием ПИН в Si (1) и $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ($y = 0.048$) (2) в зависимости от длительности импульсов нагрузки ($t_p = t_i$). Пробеги нормированы на значение среднего пробега при статическом нагружении, $\sigma_i = 15$ МПа, $T = 873$ К. Светлыми ромбиками показаны данные, полученные на образцах кремния, выращенного бестигельной зонной плавкой при $\sigma_i = 7$ МПа, $T = 873$ К [6]

пульса ($\sim 10t_a$), чем в образцах Si ($\sim t_a$).

Как показано в [6], столь большая длительность выхода скорости дислокации на насыщение связана с накоплением на линии дислокации перегибов и образованием суперкинков. Формирование суперкинков происходит при наличии достаточно сильных барьеров для движения кинков, когда время задержки перегиба у препятствия превышает время формирования новой пары кинков. В теории рассматривались два типа препятствий для движения перегиба. Первый тип — это дефекты структуры дислокационного ядра или дефекты, расположенные в непосредственной близости от него: ступеньки на дислокации, кластеры примесных атомов и т. д. [20, 21]. Второй тип — флуктуации плотности точечных дефектов вдоль линии дислокации, определяющие локализацию перегиба в поле случайной силы [10].

Динамика кинков существенно зависит от того, какой из этих типов препятствий является определяющим. Для ее исследования были проведены эксперименты по изучению зависимости среднего пробега дислокаций в образцах SiGe с различным содержанием германия от длительности «пауз» между импульсами нагрузки (рис. 3). Видно, что имеются качественные различия между кривыми. Образцы с содержанием германия 2 ат. % (кривая 1) имеют S-образную форму с точкой перегиба. Подобные за-

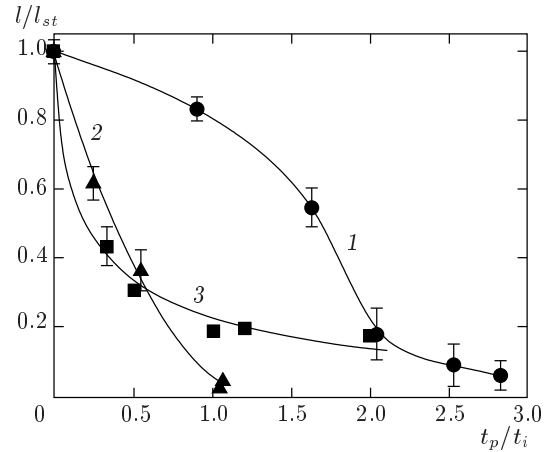


Рис. 3. Средние пробеги 60° -дислокаций в $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ под действием ПИН как функция относительной длительности «пауз» между импульсами; $y = 0.02$ (1), 0.033 (2), 0.055 (3); $t_i = 0.8t_a$, $\sigma_i = 15$ МПа, $T = 873$ К

висимости наблюдались в кристаллах кремния, выращенных методом зонной плавки [6]. В работе [8] была предложена модель, дающая качественное объяснение таких зависимостей как следствие увлечения и перераспределения подвижных точечных дефектов движущейся дислокацией с ее полной иммобилизацией при больших «паузах».

Кристаллы с содержанием германия 3.3 и 5.5 ат. % (кривые 2, 3, рис. 3) демонстрируют монотонное уменьшение дислокационных пробегов при удлинении «пауз», подобно наблюдаемому в кристаллах германия [9]. Однако в образцах Ge для такого уменьшения необходимо было в паузах прикладывать напряжение противоположного знака.

Сопоставим эти зависимости с моделью, учитывающей только изменение энергии перегиба в поле точечного дефекта [20, 21]. Она определяет линейный дрейф перегиба под действием приложенной силы.

Согласно теории, на дислокации, даже в отсутствие сдвиговых напряжений, существует термодинамически равновесная плотность кинков. Приложение нагрузки вызывает их дрейф, что должно приводить к движению дислокации даже при сколь угодно большой длительности пауз. Эти тепловые кинки определяют не нулевое, а некоторое минимальное значение скорости дислокации в условиях ПИН при отсутствии подгрузки в паузах [22]:

$$V_{min} \approx \exp \left[-\frac{(\alpha ab \sigma_i)^{1/2}}{kT} \right] V_{st},$$

где α — постоянная упругого взаимодействия кинков, b — величина вектора Бюргерса дислокации. В условиях эксперимента величина V_{min} равнялась бы примерно $V_{st}/2$. Однако в наших опытах она была более чем на порядок меньше.

Неравновесные кинки, рождающиеся в импульсах напряжения, согласно теории [23] приводят к линейно уменьшающемуся с увеличением длительности пауз в условиях ПИН вкладу в пробег дислокаций:

$$\frac{l}{l_{st}} = 1 - \frac{|v_p| t_p}{v_i t_i}, \quad (2)$$

где $v_{i,p}$ — скорости движения перегибов в импульсе и в паузе. Это предсказание не соответствует полученным экспериментальным данным. Кривая 3 на рис. 3 явно нелинейна и даже качественно не согласуется с (2). Кривая 2, на первый взгляд, может быть приближенно описана линейным уравнением. Как видно из хода кривой 2, полная релаксация кинков происходит за время $t_p \approx t_i$. Согласие с экспериментом достигалось бы лишь тогда, когда

$$\frac{|v_p|}{v_i} \approx 1,$$

Для этого необходимо, чтобы в импульсах нагрузки и в паузах на перегибы действовали практически одинаковые силы. Однако в обсуждаемом эксперименте внешние напряжения в паузах не прикладывались, а внутренние, обусловленные упругим взаимодействием перегибов в паре [1], как легко оценить, слишком малы.

Таким образом, в рамках модели движения кинков в случайном потенциале не удастся описать наши экспериментальные данные по движению дислокаций под действием прерывистого импульсного нагружения в кристаллах SiGe. Необходимо принимать в расчет такой фактор, как неоднородность распределения примесей между смежными канавками рельефа Пайерлса. Эта неоднородность определяется перераспределением и накоплением точечных дефектов в окрестности ядра дислокации, что обуславливает дополнительное понижение ее энергии. Это создает силу, возвращающую перегибы к центрам зарождения, и, как показано в [24], определяет появление стартовых напряжений для движения дислокации

$$\sigma_s = (c_1 - c_2) \frac{u}{ab}. \quad (3)$$

Здесь $c_{1,2}$ — концентрации точечных дефектов в смежных канавках потенциального рельефа, u — энергия короткодействующего взаимодействия дислокации с точечным дефектом.

Как уже отмечалось, в этом приближении возмущение потенциального рельефа точечными дефектами, в том числе и случайно расположенными атомами Ge, приводит к смене динамики перегиба — движение перегибов при определенных условиях может характеризоваться качественно иным типом кинетических закономерностей — так называемой гетерогенной динамикой с нелинейным дрейфом (1) при $\sigma < \sigma_c$,

$$\sigma_c \approx \sigma_0 + \sigma_s, \quad (4)$$

$$\sigma_0 = (c_1 + c_2) \frac{u^2}{2kTab}. \quad (5)$$

При напряжениях $\sigma > \sigma_c$, не слишком близко к порогу, скорость перегиба в поле случайной силы описывается выражением [11, 12, 25]

$$v_k = \frac{D_k}{kT} (\sigma - \sigma_c) ab, \quad (6)$$

где σ принимает значения σ_s в «паузах» и $\sigma_i - \sigma_s$ в импульсах нагрузки. Однако, если мы оценим параметр $\delta = \sigma/\sigma_c$ (см. (1)), из уравнения (4) следует, что в наших экспериментах в «паузах» всегда $\delta < 1$, следовательно, модель линейного дрейфа (2) неприменима также и в приближении модифицированной скорости кинков (6). Таким образом, необходимо рассматривать режим нелинейного дрейфа перегибов. Модель, рассматривающая этот режим, представлена в следующем разделе.

3.2. Движение дислокации под действием прерывистого импульсного нагружения в условиях гетерогенной динамики перегибов — модель и сопоставление с экспериментом

Опишем вкратце некоторые представления гетерогенной динамики, нужные для описания представленных экспериментальных данных. Переход к гетерогенной динамике обусловлен существованием широкого спектра $P(\tau)$ времен задержки перегибов τ на препятствиях, созданных флуктуациями плотности дефектов. Переход имеет место, когда вместо торможения перегиба многими типичными средними барьерами определяющим становится торможение одним наиболее сильным барьером в пределах длины свободного пробега. Это иллюстрирует простое соображение [10].

Пусть $P(\tau)$, вероятность встретить барьер со временем задержки большим чем τ ,

$$P(\tau) = \int_{\tau}^{\infty} p(t) dt$$

($p(t)$ — плотность вероятности), убывает при больших временах как $1/\tau^{\delta}$. Тогда среднее время преодоления барьера

$$\langle \tau \rangle = \int_0^{\infty} \tau p(\tau) d\tau = \int_0^{\infty} P(\tau) d\tau$$

является конечным для $\delta > 1$ и расходится для $\delta \leq 1$. Таким образом, при $F \leq F_c$, где F_c соответствует значению δ равному единице в (1), $\langle \tau \rangle \rightarrow \infty$ и средняя скорость перегибов обращается в нуль.

В этих условиях время прохождения некоторого отрезка пути определяется самым сильным барьером на нем. Вероятность встретить на длине x барьер со временем задержки, большим t , может быть оценена как $(x/\Delta l)P(t)$, где Δl — средняя ширина барьера и $x/\Delta l$ — количество «независимых положений». Как правило, наиболее сильный и поэтому редкий барьер, присутствующий на длине l , удовлетворяет условию

$$\frac{x}{\Delta l} P(t) \approx 1.$$

Это соотношение приводит к нелинейной зависимости смещения x со временем t (ср. с (1)):

$$x \approx \frac{\Delta l}{P(t)} \propto t^{\delta}.$$

Подчеркнем, что этот кинетический закон не является детерминированным, и более уместной является его вероятностная интерпретация, в которой x , вообще говоря, является случайной величиной со средним значением, равным среднему расстоянию $\langle x \rangle \approx \Delta l/P(t)$ между соответствующими барьерами.

Хотя движение перегиба в гетерогенном режиме не может быть описано средней скоростью (это нуль), дислокация сохраняет конечную подвижность, и ее скорость может быть оценена из следующего соображения. Обозначим частоту формирования пар перегибов в единицу времени на единице длины дислокации под действием постоянного напряжения как J_0 . Плотность перегибов, зародившихся к моменту времени t , равна $J_0 t$, и среднее расстояние между ними $1/J_0 t$. Среднее смещение перегибов в течение этого времени

$$x \approx x_0 \left(\frac{t}{t_0} \right)^{\delta}.$$

Когда это смещение становится равным среднему расстоянию между перегибами, начинается процесс их слияния, и дислокация переходит в следующую долину рельефа Пайерлса. Таким образом, длительность процесса перехода t_a определяется уравнением

$$\frac{1}{J_0 t} = x_0 \left(\frac{t}{t_0} \right)^{\delta}, \quad (7)$$

что приводит к выражению

$$t_a = \frac{t_0}{(J_0 t_0 x_0)^{1/(1+\delta)}}.$$

Отсюда скорость стационарного движения дислокации равна

$$V = \frac{a}{t_a} = \frac{a}{t_0} (J_0 t_0 x_0)^{1/(1+\delta)}. \quad (8)$$

Метод прерывистого импульсного нагружения — наиболее подходящая методика для экспериментального исследования нелинейных режимов движения перегиба. Как показано в работе [16], дислокационные перегибы в SiGe в исследуемом диапазоне напряжений двигаются в режиме нелинейного дрейфа при движении как «вперед» при импульсном нагружении, так и «назад» в «паузах». В обоих случаях перемещения перегиба описываются кинетическим законом (1), но с различными показателями степени δ_i и δ_p , что определяется различными величинами сил, действующих на перегиб $F_{i,p} = \sigma_{i,p} ab$. Отметим, что барьеры для движения перегиба вперед и назад формируются флуктуациями разного знака. Поэтому они не коррелируют между собой (при обратном движении барьер для движения вперед не играет существенной роли, и наоборот).

В отличие от стационарного режима движения, в случае прерывистого нагружения для недавно рожденного перегиба появляется новая возможность возвратиться в течение «паузы» к центру зарождения и аннигилировать со своим «напарником». Поэтому мы должны учитывать только перегибы, оставшиеся после полного цикла нагружения «импульс нагрузки + пауза». На стадии распространения перегиба необходимо учесть возможность для перегибов, которые преодолели барьер в течение импульса, вернуться в исходное положение перед барьером в течение последующей паузы, а также уменьшение эффективной частоты попыток преодоления барьера из-за отхода перегиба назад от барьера в ходе предыдущей «паузы». Учет этих поправок (см. Приложение) позволяет получить выражение

для пробегов дислокаций в условиях прерывистого импульсного нагружения:

$$\frac{l}{l_{st}} = (I_1 I_2^{\delta_i})^{1/(1+\delta_i)}, \quad (9)$$

где

$$I_1 = \int_0^1 dt \frac{t^{2\delta_i} (t^{\delta_i} + 3x_p/x_i)}{(t^{\delta_i} + x_p/x_i)^3}, \quad (10)$$

$$I_2 = \int_0^1 dt \frac{t^{\delta_i} (1-t)^{\delta_i}}{(x_p/x_i + t^{\delta_i}) [x_p/x_i + (1-t)^{\delta_i}]}, \quad (11)$$

$x_i \equiv x_i(t_i)$, x_p — среднее расстояние между барьерами для обратного движения со временем преодоления, большим, чем продолжительность паузы t_p , ($x_{i,p}(t) \equiv x_0(t/t_0)^{\delta_{i,p}}$).

Сравним теперь экспериментальные данные (кривая 3, рис. 3) с теорией. Согласно теории Хирта и Лоте [1], скорость стационарного движения дислокации при линейном дрейфе кинков выражается через концентрацию перегибов c_k и их скорость v_k (6) следующим образом: $V = ac_k v_k$. Концентрация перегибов в области низких напряжений, как было показано в [1], от напряжения не зависит. Таким образом, зависимость скорости дислокации от напряжения при $\sigma > \sigma_c$ имеет вид

$$V = c_k \frac{D_k}{kT} (\sigma - \sigma_c) a^2 b. \quad (12)$$

В области ниже порога, $\sigma < \sigma_c$, зависимость V от напряжения нелинейна и определяется формулой (8).

Для оценки критического напряжения сдвига $\sigma_c = F_c/ab$, когда средняя скорость перегиба обращается в нуль, построим график зависимости средней скорости дислокации от сдвигового напряжения. На рис. 4 показана зависимость $V(\sigma)$ для образцов SiGe с концентрацией германия 5.5 ат.%, построенная в линейных координатах. Видно, что при напряжениях 30–70 МПа экспериментальные данные могут быть хорошо описаны линейной зависимостью вида (12) с $\sigma_c = 17.68$ МПа. Используя это значение, а также t_0 и x_0 в качестве подгоночных параметров, была рассчитана зависимость (9). Сплошная линия на рис. 5 представляет результат подгонки. Видно, что расчет хорошо согласуется с экспериментальными данными при значениях параметров: $t_0 = 8.25$ мс и $x_0 = 22b$.

Используя эти значения, оценим коэффициент диффузии перегиба из соотношения

$$D_k \approx \frac{x_0^2}{2t_0} = 2.29 \cdot 10^{-15} \text{ м}^2/\text{с} \quad (13)$$

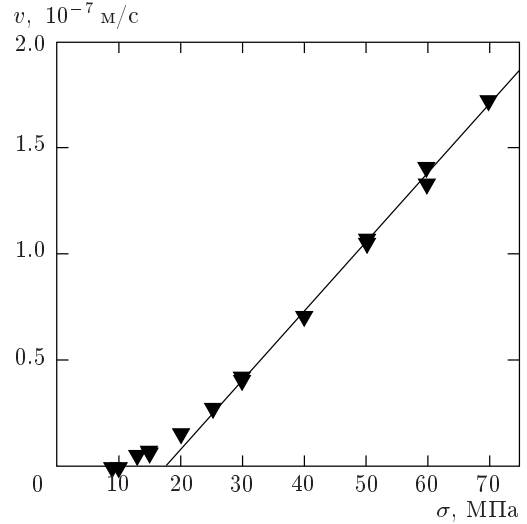


Рис. 4. Зависимость скорости 60°-дислокаций от напряжения в Si_{1-y}Ge_y, y = 0.055 (рис. 1, кривая 3), построенная в линейных координатах

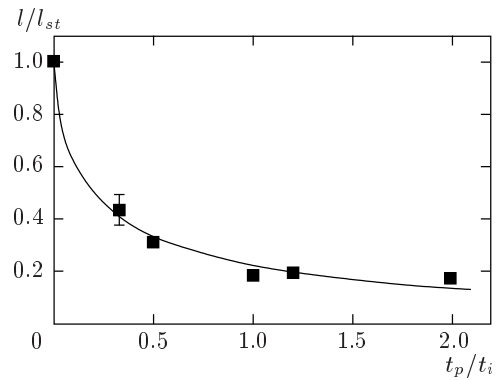


Рис. 5. Сопоставление экспериментальных данных, представленных на рис. 3 (кривая 3), с расчетами по модели (9)–(11) (сплошная линия)

и энергию активации [1]

$$W_m = kT \ln \left(\frac{\nu_D b^2}{D_k} \right) \approx 1.55 \text{ эВ}. \quad (14)$$

Это значение достаточно близко к оценке, полученной для энергии миграции перегиба на дислокациях в чистом кремнии [6].

Анализ результатов, полученных для образца SiGe с промежуточной концентрацией германия 3.3 ат.% (кривая 2, рис. 3) показал, что в рамках модели (9) не удается достичь удовлетворительного описания экспериментальных данных. Для описания этой зависимости, видимо, требуется более

сложная модель, принимающая во внимание как неоднородность распределения точечных дефектов вдоль дислокационной линии (торможение перегибов в поле случайной силы), так и градиент концентрации дефектов поперек дислокации (увлечение подвижных примесей движущейся дислокацией). Развитие такой модели требует отдельного рассмотрения.

Таким образом, изменение качественного вида кривых на рис. 3 с ростом концентрации германия свидетельствует о постепенной смене механизма, контролирующего динамику перегибов, от лавинообразного увлечения примесей с иммобилизацией дислокаций (случай чистого Si) к квазистатическому влиянию примесей с ярко выраженным нелинейным дрейфом кинков, как в Ge.

3.3. Следы за дислокациями в кристаллах сплава кремний–германий

Одним из многообразных проявлений взаимодействия дислокации с точечными дефектами является выявление на протравленной поверхности различных материалов разного рода следов, оставляемых движущимися дислокациями [26–30]. В данной работе было обнаружено, что при движении индивидуальных дислокаций под действием напряжений от 20 до 35 МПа при температуре 873 К в образцах SiGe, содержащих 0.96 ат. % Ge, избирательным травлением выявляются следы в виде случайно расположенных плоскодонных ямок травления на линии пересечения обметенной части плоскости скольжения дислокации и поверхности наблюдения. Размер ямок-следов был заметно меньше, чем размер дислокационных ямок травления (рис. 6).

Следует отметить, что, в отличие от ранее обнаруженных следов [28–30], в наших образцах следы начинали выявляться только после удаления поверхностного слоя в 3–4 мкм толщиной. Послойное удаление материала и травление показали, что вначале выявляются следы, расположенные ближе к начальному положению дислокации (рис. 6а). При последующем удалении слоев наряду с ранее обнаруженными следами появлялись новые, расположенные ближе к конечному положению дислокации (рис. 6б). Часть ранее выявленных следов при этом более не вытравливалась. Максимальное количество ямок в цепочке выявлялось при снятии слоя 10–15 мкм. При дальнейшей полировке количество вытравливаемых ямок уменьшалось (рис. 6в). После полного удаления дислокационной полупетли, следы также не вытравливались.

Было также обнаружено, что следы выявляются только за определенными типами дислокаций. На поверхности образцов, где действовали сжимающие напряжения, цепочки следов вытравливались только на смешанной стороне (как за винтовыми, так и за шестидесятиградусными дислокациями), а на поверхности растяжения — только на шестидесятиградусной стороне.

Анализ изменения положения ямок травления по мере удаления слоев показывает, что они представляют собой протяженные квазиодномерные дефекты, подобные наблюдавшимся в [28]. Эти дефекты лежат в плоскости скольжения дислокации, однако ориентированы параллельно дислокационному сегменту, расположенному на противоположном конце полупетли, а не сегменту, их сформировавшему.

При повторном движении дислокаций в тех же условиях было обнаружено, что положение выявленных после первого нагружения следов не изменилось. Следует отметить, что на свежеобметенной части плоскости скольжения травление выявляло следы, как и при первом нагружении, только после удаления поверхностного слоя толщиной 10–12 мкм. Как и после первого нагружения, сначала вытравливались ямки, расположенные ближе к исходному положению дислокации. Максимальное количество следов в цепочке теперь выявлялось после удаления слоя толщиной 20–25 мкм.

Дальнейшие нагружения показали, что при каждом последующем увеличивается глубина, на которой начинают выявляться следы, а количество ямок травления в цепочке уменьшается. Когда суммарное время деформации образцов превышает 1.5 ч, следы не выявляются. При этом время нахождения образцов в печи при температурах 723–873 К, учитывая времена вывода, стабилизации температуры и охлаждения с печью, составляет примерно 5.5 ч. Также не выявлялись следы за дислокациями, введенными в образец, предварительно отожженный в течение 3 ч при 873 К.

Какова же природа следов, выявленных в кристаллах SiGe? Следы в виде цепочки ямок травления [27], наблюдавшиеся ранее в щелочно-галоидных кристаллах, интерпретировались как результат травления дислокационных диполей, возникающих в результате поперечного скольжения. Однако в кремнии (а исследуемые нами образцы представляли собой, по сути, сильно легированный кремний) образование диполей происходит лишь при значительной пластической деформации и температурах на 200–300 градусов выше используемой в наших экспериментах [26].

Рис. 6. Поверхность (111) образца $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ ($y = 0.0096$) при последовательном удалении слоев материала химической полировкой и избирательном химическом травлении; удалено 7.5 (а), 10.7 (б), 13.5 мкм (в); 1 — дислокационные ямки травления, 2 — следы за дислокациями

Другая возможная причина появления цепочки ямок травления — размножение дислокаций при преодолении локальных препятствий. Однако используемые в эксперименте напряжения и температура слишком малы для размножения дислокаций. Кроме того, размеры ямок травления следов были существенно меньше, чем у дислокационных ямок травления, а их положение при повторных нагружениях не изменялось.

Исходя из этого, было предположено, что причина появления следов за дислокациями заключается в сбросе дислокацией части атмосферы точечных дефектов. В [28] показано, что в определенных условиях (при изменении направления движения или резком увеличении скорости) дислокация может сбросить часть своей примесной атмосферы. В местах такого сброса избирательным химическим травлением выявлялись плоскодонные треугольные ямки.

Неравномерное расположение ямок позволяет заключить, что сбросы атмосферы происходят в результате преодоления дислокацией случайно распо-

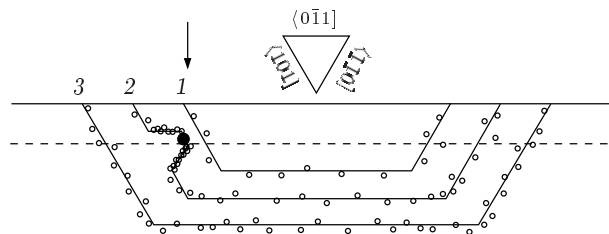


Рис. 7. Схема формирования одномерных дефектов при образовании суперкинков на сегменте дислокации (ломаная линия) в процессе преодоления локального препятствия (черный кружок). 1, 2, 3 — последовательные положения дислокационной петли, светлые кружки — точечные дефекты, горизонтальной штриховой линией показана глубина, на которой начинает выявляться след, а стрелкой — его местоположение

ложенных локальных препятствий. На рис. 7 представлена возможная схема такого процесса. При встрече дислокации с локальным барьером, ее уда-

ленные от препятствия части продолжают движение, приводя к накоплению кинков в области препятствия и образованию суперкинков. После преодоления барьера, покоившиеся суперкинки приходят в движение, сбрасывая часть атмосферы точечных дефектов. Поскольку один из суперкинков параллелен поверхности наблюдения, выявление оставленного им следа избирательным химическим травлением маловероятно. Другой же суперкинк, направленный вдоль $[0\bar{1}\bar{1}]$, и оставляет искомый след. Возникновение следов только в определенном интервале сдвиговых напряжений также подтверждает эту гипотезу: при малых сдвиговых напряжениях образование суперкинков становится энергетически невыгодным, а при высоких дислокация преодолевает локальный барьер силовым образом без образования суперкинков.

Тот факт, что следы не выявляются после отжига кристаллов, показывает, что препятствия для движения дислокации легко отжигаются. Это является косвенным свидетельством того, что локальные барьеры являются кластерами точечных дефектов. Последовательное увеличение глубины, начиная с которой выявляются следы, может быть объяснено отжигом кластеров и выносом точечных дефектов на поверхность кристалла. Образцы SiGe состава 0.96 ат. % были вырезаны из начальной части слитка вблизи затравки. Поскольку в образцах с более высоким содержанием Ge, которые были вырезаны из частей слитка, дальше отстоящих от затравки, следы не выявлялись, можно предположить, что причиной возникновения кластеров точечных дефектов являлось пересыщение начального участка слитка точечными дефектами в процессе роста.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Установлено, что беспорядок, вносимый атомами Ge, приводит к формированию суперкинков на линии дислокации в процессе ее движения под действием напряжений ≤ 30 МПа. Показано, что увеличение концентрации германия в SiGe приводит к постепенной смене контролирующего динамику перегибов механизма от лавинообразного увлечения примесей с иммобилизацией дислокаций к квазистатическому влиянию примесей с ярко выраженным нелинейным дрейфом кинков. Следы в виде цепочек ямок травления, обнаруженные в образцах SiGe с содержанием 0.96 ат. % Ge, вероятно, связаны с образованием суперкинков на кластерах точечных дефектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта INTAS № 96-363.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Опишем ожидаемые закономерности движения дислокации с нелинейным дрейфом перегибов в условиях нагружения импульсами амплитуды σ_i , разделенных «паузами», когда приложено напряжение противоположного знака σ_p (или равное нулю). Можно выделить две основные стадии процесса: формирование пар перегибов и их распространение до объединения с перегибами из соседних пар. Рассмотрим сначала стадию формирования пары перегибов. Как уже говорилось, на единице длины дислокации в течение любого временного интервала dt под действием постоянного напряжения зарождается $J_0 dt$ перегибов. В случае прерывистого нагружения появляется новая возможность возвратиться в течение «паузы» к центру зарождения и аннигилировать со своим «напарником». Поэтому мы должны учитывать только перегибы, оставшиеся после полного цикла нагружения. Вычислим их количество.

Принимая во внимание независимость флуктуаций плотности дефектов, создающих различные уединенные барьеры, будем описывать их пространственное распределение с помощью распределения Пуассона со средней плотностью $n = P(t)/\Delta l$. Хотя эта интерпретация не совсем точна, и более точное описание может быть достигнуто на основе законов Леви (см., например, [12, 31, 32]), мы будем использовать ее ради простоты и очевидности. В частности, она позволяет простое описание распределения расстояний между барьерами. Например, вероятность того, что перегиб не встретит барьера на расстоянии x , равна $\exp(-nx)$, а вероятность встретить следующий барьер на расстоянии между x и $x + dx$ от предыдущего равна $\exp(-nx)ndx$.

Вероятность для перегиба, рожденного в момент времени t' после начала импульса нагружения, удалиться от его места рождения на расстояние в интервале от x_1 до $x_1 + dx_1$ к концу импульса длительностью t_i равна

$$\exp\left[-\frac{x_1}{x_i(t_i - t')}\right] \frac{dx_1}{x_i(t_i - t')}.$$

Здесь $x_i(t)$ — среднее расстояние между барьерами со временем преодоления большим, чем t ,

$$x_i(t) \approx x_0 \left(\frac{t}{t_0}\right)^{\delta_i}.$$

Аналогично, вероятность для второго перегиба в паре отдалиться на расстояние в интервале от x_2 до $x_2 + dx_2$ равна

$$\exp\left[-\frac{x_2}{x_i(t_i - t')}\right] \frac{dx_2}{x_i(t_i - t')}.$$

Плотность вероятности $p_r(x)$ перегибам пары быть на расстоянии x друг от друга равна

$$\begin{aligned} p_r(x) &= \int_0^\infty \frac{dx_1}{x_i(t_i - t')} \exp\left[-\frac{x_1}{x_i(t_i - t')}\right] \times \\ &\times \int_0^\infty \frac{dx_2}{x_i(t_i - t')} \exp\left[-\frac{x_2}{x_i(t_i - t')}\right] \delta(x_1 + x_2 - x) = \\ &= \frac{x}{x_i^2(t_i - t')} \exp\left[-\frac{x}{x_i(t_i - t')}\right]. \end{aligned} \quad (15)$$

Тогда вероятность $P_r(x)$ того, что пара перегибов не аннигилирует в течение паузы, равна вероятности того, что суммарный пробег перегибов в течение «паузы» меньше, чем x . Поскольку плотность вероятности перегибам пары иметь в «паузе» относительный пробег x' равна (аналогично (15) с заменой x_i на x_p) $(x'/x_p^2) \exp(-x'/x_p)$, имеем

$$\begin{aligned} P_r(x) &= \int_0^x \frac{x'}{x_p^2} \exp\left(-\frac{x'}{x_p}\right) dx' = \\ &= 1 - \left(\frac{x}{x_p} + 1\right) \exp\left(-\frac{x}{x_p}\right). \end{aligned} \quad (16)$$

Интегрируя произведение вероятностей (15) и (16) по всем возможным x от 0 до ∞ , получим долю перегибов, переживших «паузу»:

$$\begin{aligned} \nu(t') &= \int_0^\infty \frac{x dx}{x_i^2(t_i - t')} \exp\left[-\frac{x}{x_i(t_i - t')}\right] P_r(x) = \\ &= \frac{x_i^2(t_i - t') [x_i(t_i - t') + 3x_p]}{[x_p + x_i(t_i - t')]^3}. \end{aligned}$$

Поэтому суммарная генерация перегибов за цикл нагрузки ΔN равна

$$\Delta N = J_0 \int_0^{t_i} dt' \nu(t') = J_0 t_i I_1, \quad (17)$$

где I_1 определяется выражением (10).

Таким образом, «паузы» между импульсами приводят к тому, что частота зарождения пар перегибов при статическом нагружении J_0 преобразуется в «эффективную» $J_0 I_1$.

Рассмотрим теперь стадию распространения перегиба в течение импульса нагрузки. Напомним, что в рассматриваемом приближении смещение перегиба в течение импульса нагружения определяется, главным образом, расстоянием до сильного барьера с данным временем преодоления τ (называемого главным). Однако, если под действием постоянного нагружения доля перегибов, которые преодолевают барьер в течение времени dt' , равна dt'/τ , присутствие «пауз» при импульсном нагружении вносит две поправки.

Первая поправка — возможность для перегибов, которые преодолели барьер в течение импульса, вернуться в исходное положение перед барьером в течение последующей «паузы». Вероятность того, что перегиб, преодолевший барьер в момент времени t' , к концу импульса удалится на расстояние x от барьера (будет находиться в интервале между x и $x + dx$) равна

$$\exp\left(-\frac{x}{x_i(t_i - t')}\right) \frac{dx}{x_i(t_i - t')}.$$

Вероятность того, что перегиб не возвратится в исходное положение, равна вероятности присутствия на длине x барьера со временем преодоления большим, чем t_p , т. е. $1 - \exp(-x/x_0)$. Интегрируя произведение этих двух вероятностей по всем возможным x , получим долю перегибов, преодолевших барьер за полный цикл

$$\frac{x_i(t_i - t')}{x_p + x_i(t_i - t')},$$

перенормирующую dt'/τ .

Вторая поправка обусловлена уменьшением эффективной частоты попыток преодоления барьера из-за отхода перегиба назад от барьера в ходе предыдущей «паузы». В то время как под действием постоянного напряжения перегиб все время прижат к барьеру, в условиях прерывистого нагружения перегиб в «паузах» возвращается назад. Его возвращение к барьеру требует некоторого времени после начала импульса нагрузки, и времени для преодоления барьера остается меньше.

Вероятность отхода на расстояние в интервале между x' и $x' + dx'$ равна

$$\exp\left(-\frac{x'}{x_p}\right) \frac{dx'}{x_p}.$$

Вероятность возвратиться к барьеру в момент t' после начала импульса равна $\exp(-x'/x_i(t'))$. Интегрирование произведения этих двух вероятностей по

всем возможным x' дает дополнительный множитель

$$\frac{x_i(t')}{x_p + x_i(t')}$$

к dt'/τ . Таким образом, часть перегибов, которые преодолевают барьер в течение цикла, равна

$$\int_0^{t_i} \frac{dt'}{\tau} \frac{x_i(t')x_i(t_i - t')}{[x_p + x_i(t')][x_p + x_i(t_i - t')]} = \frac{t_i}{\tau} I_2,$$

где I_2 определяется выражением (11).

Теперь у нас есть все необходимое для обобщения уравнения (8) и вычисления модифицированной скорости дислокаций при прерывистом импульсном нагружении. Пусть переход дислокации в следующую долину минимума занимает n циклов. Это означает, что барьер, контролирующий распространение кинка и предотвращающий его объединение с антикинком, преодолевается за n циклов с вероятностью близкой к единице

$$nI_2 \frac{t_i}{\tau} \approx 1.$$

Длина свободного пробега перегиба, соответствующая среднему расстоянию между такими барьерами, определяющими объединение перегибов, равна $x_i(\tau) \approx x_i(nI_2t_i)$.

Мы также знаем, что количество перегибов, зародившихся на единице длины дислокации за n циклов, составляет $n\Delta N$ со средним расстоянием между ними $1/n\Delta N$. Приравнявая среднее расстояние между перегибами к длине свободного пробега перегибов, получаем условие перехода дислокации в следующую долину

$$\frac{1}{n\Delta N} = x_i(nI_2t_i). \quad (18)$$

Решая это уравнение относительно n , получаем в результате перенормировку длительности перехода дислокации в условиях статического нагружения t_a в эффективную длительность при прерывистом нагружении nt_i . Принимая во внимание, что смещение дислокации l обратно пропорционально длительности процесса перехода, получаем выражение (9).

ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Атомиздат, Москва (1972), с. 358.
2. A. Seeger, J. de Phys. **42**, C5-201 (1981).
3. H. R. Kolar, J. C. H. Spence, and H. Alexander, Phys. Rev. Lett. **77**, 4031 (1996).
4. K. Maeda, M. Inoue, K. Suzuki et al., J. de Phys. III **7**, 1451 (1997).
5. C. Koch, J. C. H. Spence, C. Zorman et al., J. Phys.: Condens. Matter **12**, 10175 (2000).
6. Ю. Л. Иунин, В. И. Никитенко, В. И. Орлов, Б. Я. Фарбер, ЖЭТФ **100**, 1951 (1991).
7. Ю. Л. Иунин, В. И. Никитенко, В. И. Орлов, Б. Я. Фарбер, ФТТ **33**, 1262 (1991).
8. Yu. L. Iunin, V. I. Nikitenko, V. I. Orlov, and B. V. Petukhov, in Proc. 10th Int. Conf. ICSMA-10, Sendai, Japan (1994), p. 101.
9. Yu. L. Iunin, V. I. Nikitenko, V. I. Orlov, and B. V. Petukhov, Phys. Rev. Lett. **78**, 3137 (1997).
10. Б. В. Петухов, ФТТ **13**, 1445 (1971).
11. M. V. Feigel'man and V. M. Vinocur, J. de Phys. **49**, 1731 (1988).
12. J.-P. Bouchaud and A. Georges, Phys. Rep. **195**, 127 (1990).
13. N. V. Abrosimov, S. N. Rossolenko, V. Alex et al., J. Cryst. Growth **166**, 657 (1996).
14. J. Donecker, A. Gerhardt, and J. Wollweber, Mater. Sci. Eng. B **28**, 18 (1994).
15. В. Н. Ерофеев, В. И. Никитенко, В. И. Половинкина, Э. В. Суворов, Кристаллография **16**, 190 (1971).
16. Yu. L. Iunin, V. I. Orlov, D. V. Dyachenko-Dekov et al., Sol. St. Phenom. **57**, 419 (1997).
17. I. E. Bondarenko, V. G. Eremenko, V. I. Nikitenko, and E. B. Yakimov, Phys. Stat. Sol. (a) **60**, 341 (1980).
18. Б. В. Петухов, ЖТФ **60**, 64 (1990).
19. E. Sirtl and A. Adler, Z. Metallkunde **52**, 529 (1961).
20. V. Celli, M. Kabler, T. Ninomiya, and R. Thomson, Phys. Rev. **131**, 58 (1963).
21. В. В. Рыбин, А. Н. Орлов, ФТТ **11**, 3251 (1969).
22. В. И. Никитенко, Б. Я. Фарбер, Ю. Л. Иунин, ЖЭТФ **93**, 1304 (1987).
23. Б. В. Петухов, Ю. И. Поляков, Кристаллография **37**, 291 (1992).
24. Б. В. Петухов, ФТТ **24**, 439 (1982).
25. Б. В. Петухов, ФТТ **41**, 1988 (1999).

26. W. C. Dash, J. Appl. Phys. **29**, 705 (1958).
27. W. G. Johnston and J. J. Gilman, J. Appl. Phys. **31**, 632 (1960).
28. В. И. Никитенко, Б. Я. Фарбер, И. Е. Бондаренко, ЖЭТФ **82**, 1539 (1982).
29. И. Е. Бондаренко, Е. Б. Якимов, Изв. АН СССР **51**, 703 (1987).
30. V. Eremenko, N. Abrosimov, and A. Fedorov, Phys. Stat. Sol. (a) **171**, 383 (1999).
31. Б. В. Гнеденко, А. Н. Колмогоров, *Предельные распределения для сумм независимых случайных величин*, Гостехиздат, ГИТТЛ, Москва–Ленинград (1949).
32. В. М. Золотарев, В. В. Учайкин, В. В. Саенко, ЖЭТФ **115**, 1411 (1999).