

## СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ЭНЕРГИИ ДЕФЕКТОВ УПАКОВКИ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛАХ.

Мозжерин А.В.

Научный руководитель – профессор Логинов Ю.Ю.

*Сибирский федеральный университет*

Полупроводниковые кремний и германий являются основными материалами современной полупроводниковой электроники, силовой электроники и солнечной энергетики. Во многих странах производство этого стратегических материалов, элементов и устройств на его основе является исключительно важной составной частью национальной экономики, и в значительной степени определяет уровень развития высокотехнологических отраслей промышленности, систем коммуникации и национальной безопасности.

Хорошо известно, что полупроводниковые кремний и германий содержат незначительное количество структурных дефектов – главным образом дислокации и дефекты упаковки.

Как показали ранние наши исследования, при использовании самых современных технологий выращивания монокристаллов кремния или германия, плотность дислокационных комплексов хотя и уменьшается, но все еще остается существенной. Вероятно, это связано с физикой образования дислокаций, а также со свойствами самого образца. Дислокация – это очень устойчивый дефект кристаллической структуры, она представляет собой линию, вдоль и вблизи которой нарушено характерное для кристалла правильное расположение атомных плоскостей. Зарождение дислокаций происходит по следующим основным механизмам:

Термомеханическое напряжение. Одной из основных причин образования дислокаций в кремнии является наличие переменных градиентов температур, существующих в кристалле во время роста. Любое отклонение от постоянного градиента температуры на границе кристаллизации вызывает неоднородное термическое расширение, ведущее к внутренним сильным напряжениям в затвердевающем кристалле и как следствие к образованию дислокаций. Из-за появления дислокаций внутренне напряжение в кристалле ослабевает. Плотность появившихся дислокаций можно выразить формулой:

$$\rho = \left(\frac{1}{a}\right) \alpha \Delta T'; \quad (1)$$

$$\alpha = \left(\frac{1}{a}\right) \left(\frac{da}{dT}\right); \quad (2)$$

Где  $\alpha$  – коэффициент термического расширения,  $a$  – период решетки.

Обычно очень трудно рассчитать существующие в кристалле напряжения, возникающие при отклонение градиента температуры от постоянной величины. Однако существование таких отклонений подтверждается наличием дислокаций в кристалле. Когда градиент температур к кристалле постоянен, термические напряжения не возникают. Другой механизм, возможно, приводящий к зарождению дислокаций является скорость охлаждения кристалла от температуры плавления. Если в выращиваемом кремнии содержится большое количество подходящих источников

дислокаций, то быстрое неравномерное охлаждение кристалла может привести к образованию дислокационного комплекса дефектов. Если таких источников в кристалле нет, то дислокационный комплекс, как правило, не образовывается, однако тогда в кристалле будут существовать большие напряжения, которые приведут к его разрушению.

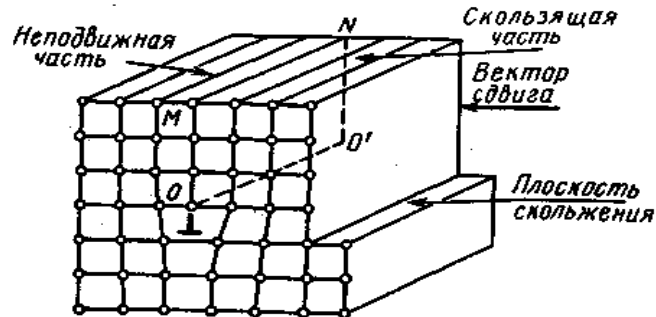


Рис. 1. Краевая дислокация  $OO'$ , возникшая в результате сдвига

В нашей работе два образца из разных партий выращенный в Красноярском крае в 2009 году (рис. 2).

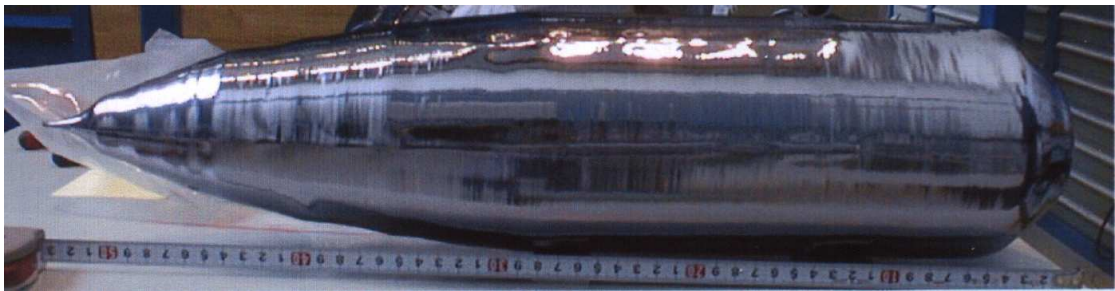


Рис. 2. Монокристалл кремния, выращенный в Красноярском крае в 2009 году

Дислокации, которые были рассмотрены нами выше, имели вектор Бюргерса, равный периоду кристаллической решетки. Такие дислокации называют полными. Наряду с ними существуют частичные дислокации, которые окружают дефекты упаковки атомов. Дефект упаковки возникает при расщеплении дислокации на две частичные, у которых вектор Бюргерса не равен периоду трансляции решетки. Дефект упаковки – это отклонение от нормальной для данного кристалла последовательности в расположении атомных слоев. Из-за разных условий образования выделяют два типа дефекта упаковки, характерных для кремния (рис. 3).

При несовпадении решеток по разные стороны от линии дислокации, что имеет место при частичной дислокации, поверхность такого несовпадения должна иметь очень большую упругую энергию, поэтому в большинстве кристаллов, где образование частичных дислокаций энергетически не выгодно, таких смещений не происходит. Однако в плотноупакованных структурах такие дефекты образуются достаточно легко.

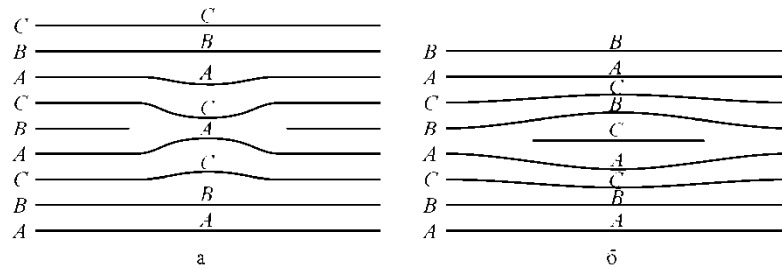


Рис. 3. Сидячая дислокация Франка: а – дефект упаковки вычитания, образованный схлопыванием вакансий; б – дефект упаковки внедрения

При образовании дефекта упаковки в кристалле как бы возникают области не свойственные им структуры. Это приводит к увеличению энергии кристалла на небольшую величину называемую энергией дефекта упаковки (ЭДУ).

Устойчивость кремния и германия к образованию дефектов связано с энергией дефекта упаковки. Чем выше в материалах значение ЭДУ тем более он устойчив к дефектообразованию.

Стандартным методом определения значения ЭДУ в кремнии был предложен С. Амелинском в его статье «Staking Fault Energy in Silicon» (1962 г.). Он исходит из значения ширины полосок дефекта упаковки ( $d$ ) которая вычисляется по формуле:

$$d = d_0 \left( 1 - \frac{2\nu}{2 - \nu} \cos 2\varphi \right) \quad (3)$$

где

$$d_0 = \frac{\mu b^2 (2 - \nu)}{8\pi\gamma (1 - \nu)} \quad (4)$$

отсюда

$$\gamma = \frac{\mu b^2 (2 - \nu)}{8\pi d_0 (1 - \nu)} \quad (5)$$

$\nu$  – коэффициент Пуассона,  $\varphi$  – угол между полным вектором Бюргерса и направлением полоски,  $b$  – вектор Бюргерса,  $\gamma$  – ЭДУ,  $\mu$  – модуль сдвига.

Используя просвечивающий электронный микроскоп JEOL 2100 нами был исследован кремний, по полученным результатам были определены: плотность дефектов, ширина полосок дефекта упаковки ( $d$ ), а затем вычислена ЭДУ ( $\gamma$ ).

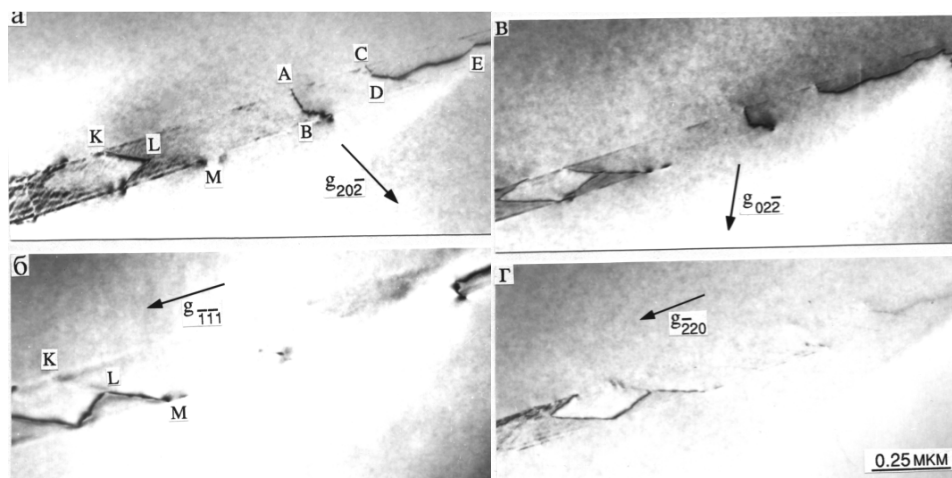


Рис. 4 Дефект упаковки в кремнии.

AB, CD – винтовые дислокации (вектор Бюргера  $\mathbf{b}$  параллелен линии дислокации  $\mathbf{l}$ ; см рис. 4 а и г. На г исчезает дислокация при  $(\mathbf{g}\mathbf{b})=0$ , где  $\mathbf{g}$  – вектор дифракции), DE – краевая, KL – смешанная дислокация.

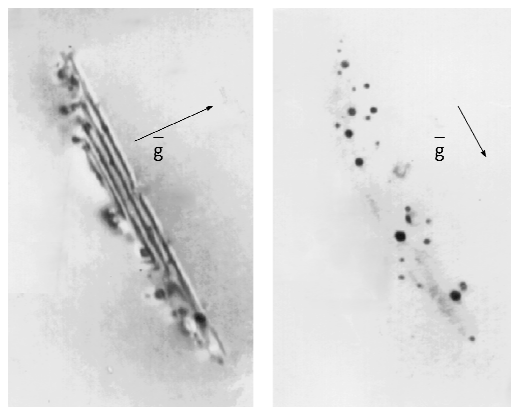


Рис. 5 Дефект упаковки в германии

Значения ЭДУ (формула 3.) составили  $5 \cdot 10^{-2}$  и  $9 \cdot 10^{-2}$  Дж/м для кремния и германия, соответственно, а плотность дефектов  $10^4$ - $10^5$  см $^{-2}$ .

По результатам работы можно сделать вывод: вычисленные значения ЭДУ -  $5 \cdot 10^{-2}$  и  $9 \cdot 10^{-2}$  Дж/м, является достаточно высоким и свидетельствует о низком содержании структурных дефектов в данных образцах. Что и подтвердилось в эксперименте: плотность дефектов имеет очень низкое значение для данной категории веществ и составляет:  $10^4$ - $10^5$  см $^{-2}$ .