

07,03

Экспериментально-теоретическое исследование процесса формирования системы кислородосодержащих преципитат–дислокационные петли в кремнии

© Р.В. Гольдштейн¹, М.В. Меженный², М.Г. Мильвидский², В.Я. Резник²,
К.Б. Устинов¹, П.С. Шушпанников¹

¹ Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН,
Москва, Россия

² Государственный научно-исследовательский и проектный институт
редкометаллической промышленности „Гиредмет“,
Москва, Россия

E-mail: goldst@ipmnet.ru

(Поступила в Редакцию 24 июня 2010 г.)

Рассмотрена модель когерентного и некогерентного кислородосодержащего преципитата, образующегося в анизотропном кристалле кремния в результате распада пересыщенного твердого раствора кислорода. На основе классического подхода Эшелби определены напряжения, действующие внутри и вне преципитата. Предложен критерий зарождения дислокации несоответствия и начала движения полной дислокационной петли внедрения, лежащей в плоскости преципитата. В рамках предложенных модели преципитата и критериев получены зависимости радиуса преципитата, при котором происходит образование дислокации несоответствия и начала движения полной дислокационной петли внедрения, при приложении к образцу внешней нагрузки. Проведено сопоставление полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 08-02-01080-а).

1. Введение

В настоящее время при изготовлении сверхбольших интегральных схем используют подложки большого диаметра. Такие подложки характеризуются более сложным характером распределения и более высоким уровнем напряжений, возникающим в них на различных стадиях технологического цикла.

Одним из эффективных способов устранения вредного влияния загрязняющих фоновых примесей является создание различного рода стоков для дефектов, которые оттягивали бы их на себя. Эти способы называют геттерированием, а сами стоки — геттерами. В технологии изготовления современных сверхбольших интегральных схем используются пластины со встроенным внутренним геттером, создаваемым путем контролируемого распада пересыщенного твердого раствора кислорода в кремнии [1].

В реальных условиях выращивания кислород входит в кристалл в концентрациях, достаточных для образования в широком интервале температур пересыщенных твердых растворов, распад которых происходит как непосредственно в процессе посткристаллизационного охлаждения слитка (частично), так и при последующих термообработках вырезаемых из него пластин. Образующиеся при этом кислородосодержащие преципитаты в зависимости от их природы и размера являются стоками для точечных дефектов (собственных и примесных), при этом образовавшиеся кислородные кластеры могут

играть роль как центров гетерогенного зарождения дислокаций, так и стопоров, затрудняя процессы их распространения и размножения. На рис. 1 представлено изображение кремниевой пластины со встроенным внутренним геттером. На рисунке отчетливо наблюдается область, имеющая исключительно низкую плотность точечных и линейных дефектов.

Природа и размеры преципитатов в кристаллической матрице определяются содержанием в ней кислорода, а также тепловыми условиями выращивания монокристаллов и режимами термообработки пластин.

Получение пластин с внутренним геттером связано с многоступенчатой термической обработкой. Не вдаваясь в подробности ее проведения, укажем лишь основные

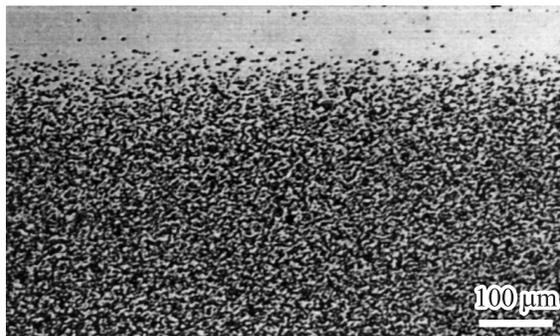


Рис. 1. Изображение кремниевой пластины со встроенным внутренним геттером.

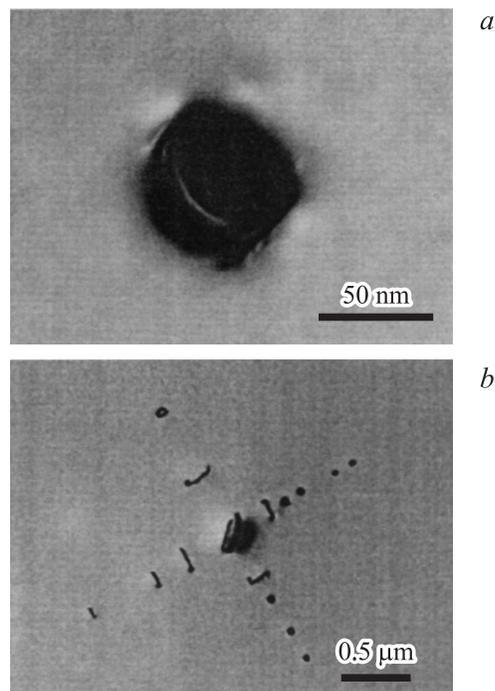


Рис. 2. Экспериментально полученные электронно-микроскопические изображения дефектов. *a* — планарный преципитат, окруженный полной дислокационной петлей; *b* — преципитат-дислокационное скопление.

процессы, происходящие при этом в кремниевой пластине.

1) Низкотемпературная термообработка (300–500°C) приводит к возникновению в пластинах локальных областей, обогащенных кислородом.

2) При проведении последующих высокотемпературных отжигов процесс распада пересыщенного твердого раствора кислорода внутри этих областей происходит с образованием когерентных кислородосодержащих преципитатов (рис. 2, *a*), а сами области исчезают [2]. Согласно экспериментальным данным [3–5], в монокристаллах кремния, выращенных методом Чохральского в направлении $\langle 100 \rangle$, преципитаты имеют пластинчатую форму с плоскостью залегания $\{100\}$, ребра совпадают с направлениями $\langle 110 \rangle$.

3) При дальнейшем отжиге преципитат увеличивается в размерах, теряя при этом когерентность с матрицей. На этой стадии в плоскости преципитата образуется полная дислокационная петля несоответствия. При этом отношение высоты к ширине преципитата примерно равно 1/10.

4) Дальнейшее увеличение размеров преципитата связано с началом генерации призматических полных дислокационных петель внедрения по механизму призматического выдавливания и приводит к образованию преципитат-дислокационных скоплений (рис. 2, *b*). Дислокационные линии данной петли совпадают с направлениями $\langle 110 \rangle$, образуя квадрат. Векторы Бюргерса, единые для всех линий дислокационной петли, могут

иметь следующие направления [3]: $[101]$, $[011]$, $[\bar{1}01]$, $[0\bar{1}1]$. На этой стадии отношение высоты к ширине преципитата примерно равно 1/4.

Две последние из перечисленных стадий представляют особый интерес, так как генерация преципитатом дислокационных петель приводит к увеличению плотности дефектов в кристалле, что снижает его качество, поэтому выявление условий образования и начала движения петель представляет собой крайне важную задачу. Именно этой задаче посвящена настоящая работа.

С целью выяснения характера возмущений, вносимых преципитатом в кремниевую матрицу, а также для проведения численных оценок сначала выполнено моделирование напряженного состояния, создаваемого кислородосодержащим преципитатом в анизотропной матрице кремния.

2. Моделирование напряженного состояния, создаваемого кислородосодержащим преципитатом в матрице кремния

Для ответа на вопрос об определении напряженно-деформированного состояния в матрице, вызываемого наличием преципитата, могут использоваться различные механико-математические модели [6]. Так, поле напряжений от преципитата может быть определено по методу эквивалентных включений Эшелби [7,8]. Однако при этом необходимо знать значения собственных деформаций преципитата, т.е. изменения размеров области, занимаемой преципитатом, вызванные фазовым превращением. Обычно собственные деформации однозначно связывают с параметрами несоответствия кристаллических решеток матрицы и включения [6]. Однако для этого *a priori* необходимо иметь точные сведения о фазовом составе включения. Кроме того, ситуация может осложняться присутствием дислокаций несоответствия на включении (или более общим случаем потери когерентности), идентификация которых затруднительна.

Для моделирования напряженного состояния преципитата и окружающей его матрицы мы использовали традиционный подход, связанный с представлением преципитата в форме сплюсненного сфероида. Поскольку распределение напряжений для разных форм включений мало различается всюду, за исключением относительно небольшой зоны, примыкающей к поверхности преципитата [7–9], такая модель вполне закономерна.

Материал матрицы и включения будем считать анизотропным с кубической кристаллической решеткой. Введем декартову систему координат с осями, совпадающими с осями кубической ячейки $\langle 100 \rangle$. Рассматриваемый кислородосодержащий преципитат в результате фазового превращения приобретает собственную неупругую деформацию, которая в отсутствие матрицы характеризовалась бы тензором ε_{ij}^0 . В результате превращения как во включении, так и в матрице возникают „тесненные

деформации“ [7] и связанные с ними напряжения. Упругие поля внутри эллипсоидальной неоднородности при этом могут быть найдены по известным формулам [7,8] следующим образом. Заменим преципитат, имеющий упругие свойства, отличные от таковых в остальном материале, эквивалентным включением из материала матрицы так, чтобы напряжения σ_{ij}^{in} и деформации ε_{kl} внутри него остались бы неизменными. Для выполнения этих условий собственные деформации такого включения (эквивалентные собственные деформации ε_{ij}^*) должны быть уже иными. Поля напряжений внутри и вне включения на основании закона Гука будут иметь следующий вид:

1) в случае преципитата и свободной от внешних напряжений матрицы

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{in} &= C_{ijkl}^1(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^0) = C_{ijkl}^0(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^*), \\ \sigma_{ij}^{out} &= C_{ijkl}^0 \varepsilon_{kl}; \end{aligned} \quad (1)$$

2) в случае наличия внешнего поля напряжений σ_{ij}^∞ (соответствующие деформации — ε_{ij}^∞)

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{in} &= C_{ijkl}^1(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^0 + \varepsilon_{kl}^\infty) = C_{ijkl}^0(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^* + \varepsilon_{kl}^\infty), \\ \sigma_{ij}^{out} &= C_{ijkl}^0(\varepsilon_{kl} + \varepsilon_{kl}^\infty). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь C_{ijkl}^0 и C_{ijkl}^1 — тензоры модулей упругости матрицы и включения соответственно. Для эквивалентного включения деформации в нем ε_{kl} , называемые „стесненными деформациями“, связаны со свободной деформацией через компоненты тензора Эшелби S_{ijkl} следующим образом:

$$\varepsilon_{kl} = S_{klpq} \varepsilon_{pq}^*. \quad (3)$$

Подстановка (3) в (1) или (2) дает систему уравнений, отражающих требование равенства напряжений внутри действительного и эквивалентного включений:

1) в случае преципитата и свободной от внешних напряжений матрицы

$$C_{ijkl}^1(S_{klmn} \varepsilon_{mn}^* - \varepsilon_{kl}^0) = C_{ijkl}^0(S_{klmn} \varepsilon_{mn}^* - \varepsilon_{kl}^*), \quad (4)$$

2) в случае наличия внешнего поля напряжений σ_{ij}^∞ (соответствующие деформации — ε_{ij}^∞)

$$C_{ijkl}^1(S_{klmn} \varepsilon_{mn}^* - \varepsilon_{kl}^0 + \varepsilon_{kl}^\infty) = C_{ijkl}^0(S_{klmn} \varepsilon_{mn}^* - \varepsilon_{kl}^* + \varepsilon_{kl}^\infty). \quad (5)$$

После определения собственных деформаций эквивалентного включения ε_{ij}^* напряжения внутри него находятся с использованием одной из частей (например, правой) уравнений (4) или (5). К примеру, в случае свободной от внешних напряжений матрицы напряжения, действующие внутри включения, могут быть записаны в виде

$$\sigma_{ij}^{in} = C_{ijkl}^0(S_{klpq} \varepsilon_{pq}^* - \varepsilon_{pq}^*). \quad (6)$$

Компоненты тензора Эшелби S_{ijkl} для изотропного случая впервые были получены Эшелби [7], компоненты данного тензора для случая кубической симметрии получены Мурой [8] и приводятся в Приложении.

Тензоры модулей упругости C_{ijkl}^0 и C_{ijkl}^1 для случая кристалла кубической симметрии могут быть записаны в виде [10]

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \mu' \sum_{p=1}^3 \delta_{ip} \delta_{jp} \delta_{kp} \delta_{lp}. \quad (7)$$

Здесь λ и μ — коэффициенты Лямэ, а μ' — третий независимый модуль, характеризующий отличие рассматриваемого случая кубической симметрии от изотропного.

Таким образом, при заданных упругих свойствах, собственной деформации и размерах включения формулы (3)–(6) дают решение внутренней задачи. При этом, если свободные деформации однородны, то „стесненные деформации“ остаются также однородными.

Поле напряжений вне преципитата является неоднородным и его нахождение связано с необходимостью численного вычисления громоздких интегралов, представленных далее. Однако поле напряжений на внешней поверхности включения может быть записано в аналитическом виде [8]

$$\sigma_{ij}^{out} = \sigma_{ij}^{in} - C_{ijkl}^0(C_{pqmn}^0 \varepsilon_{mn}^* N_{kp}(\mathbf{n}) D^{-1}(\mathbf{n}) n_q n_l + \varepsilon_{kl}^*). \quad (8)$$

Здесь \mathbf{n} — вектор внешней нормали к поверхности включения,

$$D(\mathbf{n}) = \varepsilon_{mnl} K_{m1} K_{n2} K_{l3}, \quad (9)$$

$$N_{ij}(\mathbf{n}) = \frac{1}{2} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} K_{km} K_{ln}, \quad (10)$$

$$K_{ik}(\mathbf{n}) = C_{ijkl}^0 n_j n_l. \quad (11)$$

Напряженно-деформированное состояние в произвольной точке вне включения может быть найдено следующим образом. Для тензора дисторсии вне эллипсоидального включения с однородной собственной деформацией можно записать [8,11]

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{out}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{4\pi} C_{klmn}^0 \varepsilon_{mn}^* \int_{S^*} N_{ik}(\bar{\xi}) D^{-1}(\bar{\xi}) \bar{\xi}_l \bar{\xi}_j dS(\bar{\xi}) \\ &- \frac{1}{2\pi} C_{klmn}^0 \varepsilon_{mn}^* \int_{L^+} y^{-1} N_{ik}(\bar{\xi}) D^{-1}(\bar{\xi}) \bar{\xi}_l \bar{\xi}_j d\theta(\bar{\xi}). \end{aligned} \quad (12)$$

Интегрирование осуществляется в пространстве векторов $\bar{\xi}$, компоненты которых связаны с компонентами вектора $\bar{\xi}$ следующими зависимостями:

$$\bar{\xi}_1 = \frac{a_1 \bar{\xi}_1}{\eta}, \quad \bar{\xi}_2 = \frac{a_2 \bar{\xi}_2}{\xi}, \quad \bar{\xi}_3 = \frac{a_3 \bar{\xi}_3}{\xi}, \quad (13)$$

где

$$\xi = \sqrt{(a_1 \bar{\xi}_1)^2 + (a_2 \bar{\xi}_2)^2 + (a_3 \bar{\xi}_3)^2}. \quad (14)$$

Компоненты вектора \mathbf{y} связаны с компонентами точки наблюдения \mathbf{x} следующим образом:

$$y_1 = \frac{x_1}{a_1}, \quad y_2 = \frac{x_2}{a_2}, \quad y_3 = \frac{x_3}{a_3}. \quad (15)$$

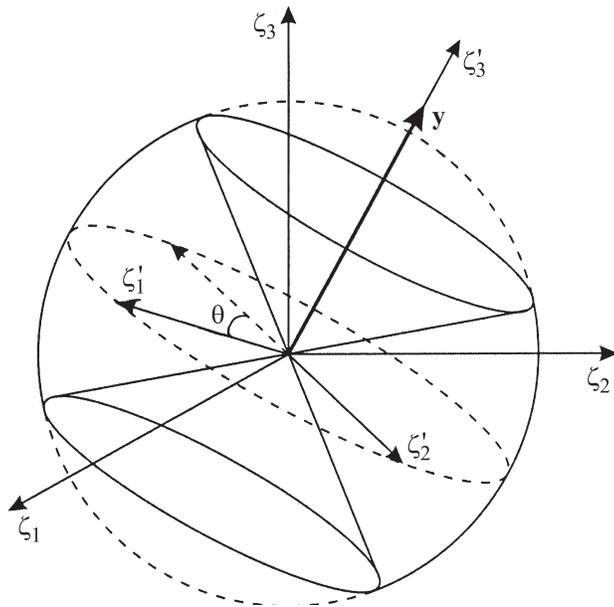


Рис. 3. Используемая система координат.

Через y в формуле (12) обозначен модуль вектора y . При сделанных обозначениях контур L^+ и поверхность интегрирования S^* в формуле (12) следующие:

$$S^* = \{(\bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2, \bar{\xi}_3) : (\bar{\xi} \cdot y) < 1\},$$

$$L^+ = \{(\bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2, \bar{\xi}_3) : (\bar{\xi} \cdot y) = 1\}. \quad (16)$$

Формулу (12) можно свести к виду, более удобному для численного интегрирования, следующим образом. Повернем систему координат $O\xi_1\xi_2\xi_3$ так, чтобы ось ξ_3 совпала с вектором y (рис. 3). Это всегда можно сделать, зная угловые координаты вектора y в сферической системе координат, которые могут быть выражены через сферические координаты точки наблюдения x .

В новой системе координат $O\xi'_1\xi'_2\xi'_3$ введем цилиндрическую систему координат следующим образом:

$$\bar{\xi}'_1 = (1 - \bar{\xi}'_3)^{1/2} \cos(\theta), \quad \bar{\xi}'_2 = (1 - \bar{\xi}'_3)^{1/2} \sin(\theta), \quad \bar{\xi}'_3 = \bar{\xi}'_3. \quad (17)$$

При этом формулу (12) можно переписать, используя только кратные интегралы

$$u_{i,j}^{\text{out}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} C_{klmn}^0 \varepsilon_{mn}^* \times \left[\int_{-1/y}^{1/y} \int_0^{2\pi} G_{ijkl}(\bar{\xi}) d\theta d\bar{\xi}'_3 - \frac{2}{y} \int_0^{2\pi} G_{ijkl}(\bar{\xi}) d\theta \right], \quad (18)$$

где введено следующее обозначение

$$G_{ijkl}(\bar{\xi}) = N_{ij}(\bar{\xi}) D^{-1}(\bar{\xi}) \xi_k \xi_l. \quad (19)$$

Формула (18) наиболее удобна для проведения численного расчета и будет использоваться в дальнейшем.

3. Когерентный и некогерентный преципитат

Вопрос о виде тензора собственных деформаций преципитата оставался до сих пор открытым. Для ответа на него выделим два предельных случая сопряжения кристаллических решеток с различными параметрами: 1) когерентное сопряжение, при этом искажения решетки вблизи границы невелики, и одному атому со стороны включения соответствует один атом со стороны матрицы; 2) некогерентное сопряжение, при котором невозможно установить взаимнооднозначное соответствие между атомами по разные стороны границы раздела.

Непосредственно из приведенных выше определений можно сделать выводы о характере собственных деформаций преципитата. Для когерентного преципитата собственные деформации в силу предположения об их однородности равны разности параметров решетки окружающего кристалла и вещества преципитата. В случае изотропной окружающей среды или кубического кристалла собственные деформации преципитата равны между собой [8]

$$\varepsilon_{11}^0 = \varepsilon_{22}^0 = \varepsilon_{33}^0. \quad (20)$$

Объемная деформация ε^0 , очевидно, равна сумме линейных деформаций

$$\varepsilon_{11}^0 + \varepsilon_{22}^0 + \varepsilon_{33}^0 = \varepsilon^0. \quad (21)$$

Для некогерентных преципитатов уравнение (20) не выполняется. При этом, если известна суммарная объемная деформация преципитата ε^0 (21), то естественно предположить, что распределение собственных деформаций в нем будет соответствовать минимуму полной энергии системы. Данный минимум для достаточно больших преципитатов (для которых доля атомов, находящихся на границе, невелика по сравнению с общим числом атомов) соответствует гидростатическому напряженному состоянию внутри преципитата [8]

$$\sigma_{11}^{\text{in}} = \sigma_{22}^{\text{in}} = \sigma_{33}^{\text{in}}. \quad (22)$$

Выписанные зависимости позволяют в рамках рассматриваемой модели рассчитать поле напряжений, создаваемое когерентным и некогерентным преципитатом в форме эллипсоида вращения.

4. Модельный расчет поля напряжений, создаваемого преципитатом. Случаи когерентного и некогерентного преципитатов

Первая сложность, которая возникает при проведении расчета, — отсутствие достоверных сведений о химическом и фазовом составе образующихся преципитатов.

В работе [4] было выдвинуто предположение о том, что химический состав кислородосодержащих преципи-

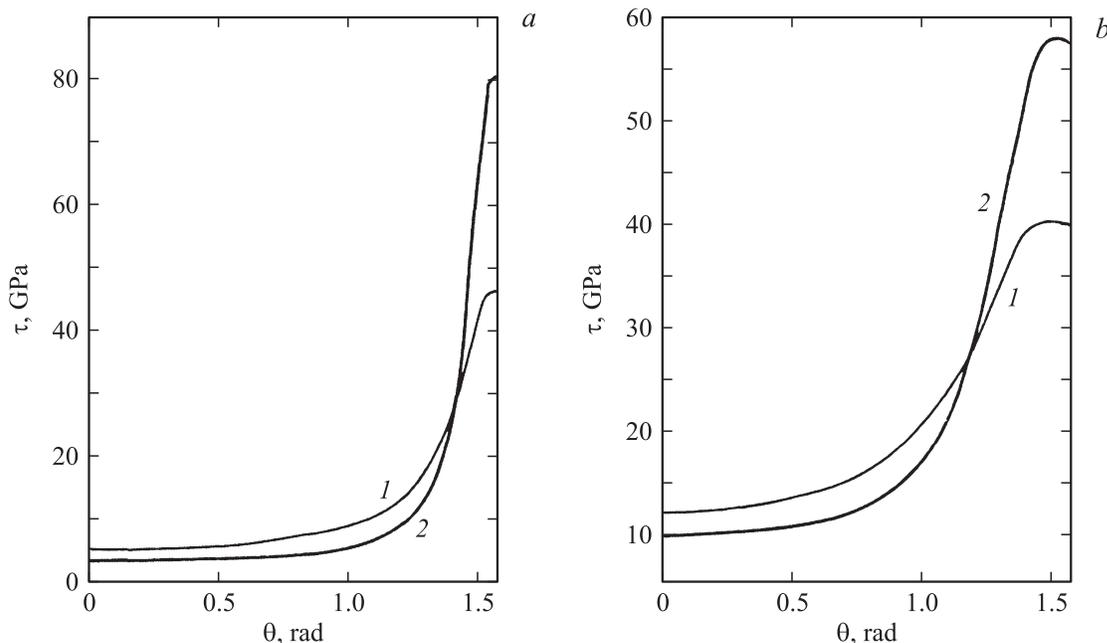


Рис. 4. Зависимость интенсивности касательных напряжений τ от угла θ , отсчитываемого вдоль меридиана на внешней поверхности преципитата. $a_3/a_1 = 0.1$ (a) и 0.25 (b). 1 — когерентный преципитат, 2 — некогерентный преципитат.

татов соответствует SiO_2 . Проведенные авторами дифракционные исследования подтвердили, что состав имеющихся в их материале преципитатов соответствует сделанному предположению.

Другая сложность заключается в том, что кристаллы SiO_2 имеют двенадцать модификаций, каждой из которых отвечает определенный тип симметрии. Определенная модификация при изменении внешних условий может потерять устойчивость и перейти в другую модификацию. Здесь будем считать, что материал преципитата соответствует поликристаллической форме SiO_2 . При этом численные данные для расчета представлены в табл. 1 [12,13].

Однако образование преципитатов стехиометрического состава происходит при достаточно больших временах отжига, когда практически весь избыточный кис-

лород из матрицы кремния переходит во вторую фазу. На ранних стадиях распада пересыщенного твердого раствора кислорода и при контролируемом образовании эффективной геттерирующей среды на основе этих кислородосодержащих преципитатов они могут иметь состав, отличающийся от стехиометрического.

Для апробации предложенного методического подхода на первом этапе нами был выполнен расчет исходя именно из стехиометрического состава преципитатов.

Используем формулу (6) для определения поля напряжений внутри преципитата. Результаты расчета для шаровой части тензора напряжений, отнесенной к собственной деформации преципитата $\varepsilon^0 = 1$, приведены в табл. 2.

Поскольку рассматриваемая задача линейна, значения напряжений, соответствующих реальному ε^0 , будут отличаться от приведенных в ε^0 раз. Оценка собственных деформаций преципитата приведена далее.

После нахождения поля напряжений внутри преципитата формулы (8)–(11) могут быть использованы для вычисления поля напряжений на его внешней поверхности. На рис. 4 приведена зависимость интенсивности касательных напряжений τ от угла θ , отсчитываемого вдоль меридиана на внешней поверхности когерентного и некогерентного преципитата. При этом интенсивность касательных напряжений определяется следующим образом:

$$\tau = \frac{1}{\sqrt{6}} \sqrt{(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + 6(\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2)} \quad (23)$$

Из приведенного расчета можно заключить, что потеря когерентности преципитата с окружающей матрицей ве-

Таблица 1. Упругие постоянные матрицы и включения

| Вещество | λ , GPa | μ , GPa | μ' , GPa |
|----------------|-----------------|-------------|--------------|
| Si | 63.94 | 79.51 | -57.32 |
| SiO_2 | 5.90 | 46.80 | - |

Таблица 2. Модельный расчет гидростатической составляющей напряженного состояния внутри преципитата

| a_3/a_1 | $(1/3)\sigma_{ii}^{\text{in}}/\varepsilon^0$, GPa | |
|-----------|--|--------------------------|
| | Когерентный преципитат | Некогерентный преципитат |
| 0.1 | -24.29 | -10.35 |
| 0.25 | -25.29 | -18.92 |

дет к снижению уровня напряжений внутри, а также, за исключением точек наибольшей кривизны, на внешней поверхности. Следовательно, на некотором этапе эволюции преципитата потеря когерентности может быть энергетически выгодна, что и наблюдается в эксперименте [14].

Чтобы использовать предложенную модель для наблюдаемых экспериментально преципитатов, нужно иметь значения реальных собственных деформаций ε^0 внутри преципитата. Здесь приводится качественная оценка их величины.

5. Качественная оценка собственной деформации преципитата

Оценку собственных деформаций преципитата можно получить из анализа преципитат-дислокационных скоплений, образующихся на поздних стадиях многоступенчатой термической обработки кремниевых пластин (рис. 5), как это было сделано в [15–17]. На рис. 5 представлены преципитат (слева) и ряд оторвавшихся от него полных дислокационных петель.

Физическая основа оценки собственных деформаций преципитата заключается в рассмотрении баланса сил, действующих на ближайшую к нему дислокацию. К таким силам относятся силы взаимодействия дислокаций с преципитатом и дислокаций между собой, а также силы сопротивления движению дислокаций. Пренебрегая влиянием последних, заключаем, что сила, с которой преципитат действует на ближайшую дислокацию F_{pd} , должна быть равна силе, с которой дислокации взаимодействуют между собой F_{dd} ,

$$F_{pd} = F_{dd}. \quad (24)$$

Необходимо отметить, что равенство (24) имеет место при учете взаимодействия только ближайших дислокаций в скоплении. Такое приближение в данном случае может быть обосновано тем, что сила взаимодействия между преципитатом и дислокацией, а также между двумя дислокациями в скоплении является функцией, быстро убывающей с расстоянием. Так, для точечных источников типа центров внедрения, к которым относятся как преципитаты, так и дислокационные петли внедрения, энергия упругого взаимодействия убывает на больших расстояниях как r^{-3} [7,18,19]. Следовательно, для силы взаимодействия, которая может рассматриваться как градиент энергии, убывание происходит в r раз быстрее, что приводит к следующим зависимостям для F_{pd} и F_{dd} :

$$F_{pd} \approx \frac{m_p m_d}{r_{pd}^4}, \quad F_{dd} \approx \frac{m_d^2}{r_{dd}^4}. \quad (25)$$

Здесь m_p и m_d — коэффициенты, определяющие интенсивность взаимодействия для преципитата и дислокации соответственно, r_{pd} — расстояние между преципитатом и дислокацией, r_{dd} — расстояние между соседними дислокациями (рис. 6). Подставляя (25) в (24), получим

$$\frac{m_p}{m_d} = \left(\frac{r_{pd}}{r_{dd}} \right)^4. \quad (26)$$

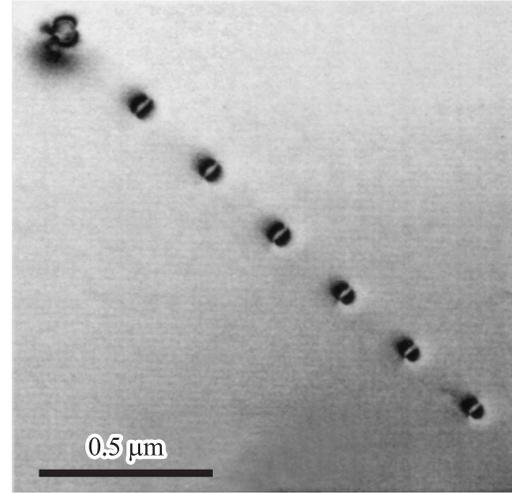


Рис. 5. Преципитат-дислокационное скопление, образующееся на поздних стадиях многоступенчатой термической обработки кремниевых пластин. Фотография получена методом просвечивающей электронной микроскопии. Преципитат расположен в левом верхнем углу.

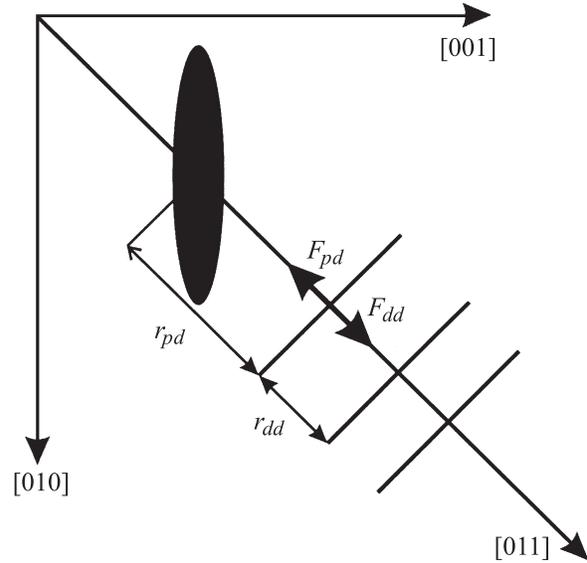


Рис. 6. Сечение преципитата плоскостью (100).

Коэффициенты, определяющие интенсивность дальнего взаимодействия для точечных источников внедрения, пропорциональны избыточным объемам [7]. Следовательно, для дислокации и преципитата они будут иметь вид

$$m_d \approx S_d b, \quad m_p \approx V_p \varepsilon^* = 2S_p a_3 \varepsilon^*. \quad (27)$$

Здесь S_d — площадь дислокационной петли, S_p — площадь сечения преципитата плоскостью (001), b — вектор Бюргера дислокации, ε^* — эквивалентная собственная деформация преципитата.

Величины ε^* и ε^0 в общем случае тензорные, связаны между собой системой линейных уравнений, содержа-

ших компоненты тензора Эшелби четвертого ранга и упругие постоянные. Для предельно тонкой пластинки в случае равенства осевых компонент собственных деформаций $\varepsilon_{11}^0 = \varepsilon_{22}^0 = \varepsilon_{33}^0$ (когерентный преципитат) и коэффициента Пуассона матрицы $\nu \approx 1/3$ (что соответствует значению для кремния) данная система для осевых компонент деформации приводит к условию [15–17]

$$\varepsilon^* \approx \frac{E^1}{E^0} \varepsilon^0. \quad (28)$$

Здесь E^0 и E^1 — модули Юнга матрицы и преципитата соответственно. В случае некогерентного плоского преципитата система уравнений (4) приводит к следующей оценке для осевых деформаций:

$$\varepsilon^* \approx \varepsilon^0. \quad (29)$$

В этом случае, как видим, осевая компонента ε^* слабо отличается от осевой компоненты собственной деформации. Факт независимости эффективных собственных деформаций от упругих модулей для предельно тонких преципитатов отмечался ранее [8]. Подставляя (28) и (27) в (26), получим [15,16]

$$\varepsilon^0 \approx \frac{b}{2a_3} \frac{E^0}{E^1} \frac{S_d}{S_p} \left(\frac{r_{pd}}{r_{dd}} \right)^4. \quad (30)$$

Учитывая тот факт, что площадь сечения преципитата плоскостью (001) примерно равна площади срывающейся с него дислокационной петли, формулу (30) можно переписать

$$\varepsilon^0 \approx \frac{b}{2a_3} \frac{E^0}{E^1} \left(\frac{r_{pd}}{r_{dd}} \right)^4. \quad (31)$$

Для проведения численных оценок используем изображение дислокационной структуры, полученные методом просвечивающей электронной микроскопии. Генерация преципитатом призматических петель происходила под действием внешних напряжений при проведении опытов по нагружению таких образцов (рис. 5). Тогда $r_{pd} = 1.18r_{dd}$, $(4\pi/3)^{1/3}a_1 = 72$ nm, $(4\pi/3)^{1/3}a_3 = 18$ nm. Множитель $(4\pi/3)^{1/3}$ введен для того, чтобы обеспечить равенство объемов пластинчатого преципитата и эллипсоидального включения, которым он моделируется. Другие данные для расчета $E^0 = 194$ GPa, $E^1 = 99$ GPa, $b = 0.384$ nm, после чего из уравнения (31) получим

$$\varepsilon^0 = 0.065. \quad (32)$$

Как указывалось выше, данная методика оценки собственных деформаций является более полезной для случая некогерентного преципитата. В случае, если фазовый состав исследуемого некогерентного преципитата известен, существует дополнительная возможность оценки его собственной деформации или проверки результатов, полученных таким образом. А именно, поскольку при потере когерентности гидростатические напряжения

внутри преципитата падают, эти напряжения, рассчитанные с учетом приведенных оценок для собственных деформаций, должны быть меньше, чем соответствующие напряжения для когерентного преципитата, посчитать собственные деформации для которого можно как разность собственных параметров решеток.

Укажем связь количества содержащегося в преципитате вещества с полученными собственными деформациями [15]. Для этого, как было указано выше, предположим, что преципитат имеет химический состав SiO_2 .

Пусть в начальном состоянии в области, которую займет преципитат, находится M атомов кремния и пусть после фазового перехода в данной области окажется kM молекул SiO_2 , где $0 < k < 1$. Учитывая, что молекулярные веса Si и SiO_2 равны $\mu_{\text{Si}} = 28$ и $\mu_{\text{SiO}_2} = 60$, а их плотности $\rho_{\text{Si}} = 2.33$ g/cm³ и $\rho_{\text{SiO}_2} = 2.65$ g/cm³, вычислим объем, занимаемый M атомами Si,

$$V_{\text{Si}} = \frac{M}{N_A} \frac{\mu_{\text{Si}}}{\rho_{\text{Si}}} = \frac{M}{N_A} \frac{28}{2.33}, \quad (33)$$

и объем, занимаемый kM молекулами SiO_2 ,

$$V_{\text{SiO}_2} = \frac{kM}{N_A} \frac{\mu_{\text{SiO}_2}}{\rho_{\text{SiO}_2}} = \frac{kM}{N_A} \frac{60}{2.65}, \quad (34)$$

где N_A — число Авогадро. Откуда для значения свободной деформации получим

$$\varepsilon^0 = \frac{V_{\text{SiO}_2} - V_{\text{Si}}}{V_{\text{Si}}} = 1.884k - 1. \quad (35)$$

Гипотетический случай, когда все атомы кремния остались на месте ($k = 1$), соответствует максимально возможной свободной деформации $\varepsilon_{\text{max}}^0 = 0.884$. По смыслу задачи деформации ε^0 не могут быть отрицательными. Таким образом, $\varepsilon_{\text{min}}^0 = 0$. Следовательно, интервал изменения собственных деформаций

$$0 < \varepsilon^0 < 0.884. \quad (36)$$

Разрешив уравнения (35) относительно доли оставшихся атомов кремния, получим

$$k = \frac{1 + \varepsilon^0}{1.884}. \quad (37)$$

Положив $\varepsilon^0 = 0$, получаем нулевое приближение для доли оставшихся атомов кремния $k_{\text{min}} = 0.53$. Таким образом, имеем следующий интервал изменения k :

$$0.53 \leq k \leq 1. \quad (38)$$

Предложенная методика позволяет оценить количество содержащегося в преципитате вещества в соответствии со сделанной оценкой ε^0 . Подставляя (32) в (37), получим искомое количество вещества

$$k = 0.57. \quad (39)$$

Полученная оценка (39) для доли оставшихся внутри преципитата атомов кремния близка к нижнему пределу k_{min} .

Если же фазовый состав преципитата неизвестен, приведенные выше вычисления необходимо повторить для всех потенциально возможных фазовых составов, используя соответствующие значения величин плотности и молекулярной массы. В результате будет получен набор возможных комбинаций собственных деформаций, фазового состава и количества оставшихся атомов кремния, что хотя и не позволяет без привлечения дополнительной информации однозначно определить ни один из перечисленных параметров, но уменьшает степень неопределенности: т.е. дает связь между этими параметрами.

6. Критерии образования дислокации несоответствия и начала движения дислокационной петли внедрения

В качестве физической основы критерия образования дислокационной петли примем концепцию, близкую к концепции Нейбера–Новожилова [20,21], а именно будем считать, что петля несоответствия образуется, если напряжения в некоторой области вблизи преципитата достигают критического значения. Размер данной области δ предполагается равным нескольким межатомным расстояниям и не зависящим от размера и формы преципитата. Среднее напряжение на площадке δ определим как

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{\delta} \int_{r_0-\delta/2}^{r_0+\delta/2} \sigma_{33}^{\text{out}} dr, \quad (40)$$

где r_0 обозначает центр площадки, на которой возникает дислокационная петля. Тогда критерий возникновения дислокационной петли несоответствия можно записать в виде

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_{\text{cr}}^{\text{nuc}}. \quad (41)$$

По аналогии критерий начала движения дислокационной петли внедрения будет следующим:

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_{\text{cr}}^{\text{mov}}. \quad (42)$$

Величины $\bar{\sigma}_{\text{cr}}^{\text{nuc}}$, $\bar{\sigma}_{\text{cr}}^{\text{mov}}$ будем считать константами для данного материала. Тогда $\bar{\sigma}_{\text{cr}}^{\text{nuc}}$ характеризует сопротивляемость материала возникновению дислокационной петли, а $\bar{\sigma}_{\text{cr}}^{\text{mov}}$ — страгиванию дислокационной петли внедрения.

Предположим, что можно провести эксперимент, в котором к образцу, содержащему преципитат, приложено поле напряжений. Кроме того, будем считать, что, увеличивая приложенное поле напряжений, можно определить моменты возникновения петли несоответствия и начала движения полной дислокационной петли внедрения. Тогда, моделируя такую ситуацию с помощью предложенной модели, можно определить критические напряжения $\bar{\sigma}_{\text{cr}}^{\text{nuc}}$ и $\bar{\sigma}_{\text{cr}}^{\text{mov}}$. Зная эти характеристики, можно в рамках предложенной модели сделать заключения о поведении преципитатов с произвольными размерами,

соотношением полуосей и при различном уровне приложенных внешних напряжений.

7. Интерпретация экспериментальных данных в рамках предложенной модели

Исследованные кристаллы кремния выращивались методом Чохральского в направлении $\langle 001 \rangle$. Образцы для исследования вырезались из пластин кремния диаметром 150 mm. Вырезанные образцы имели форму параллелепипедов размером $25 \times 4 \times 0.6$ mm. После химической полировки толщина образцов была равной 0.5 mm. Далее образцы помещались в устройство для четырехточечного изгиба.

Напряжения, вызывающие генерацию дислокаций от внутренних источников в объеме пластины, определяли по началу процесса генерации дислокаций от подавляющего большинства преципитатов в областях образца, достаточно удаленных от опор и краев образцов. Структурные особенности образцов исследовали методами оптической (избирательное травление проводили в травителе Янга [22]) и просвечивающей электронной микроскопии. При этом четко контролировались самые ранние стадии начала призматического выдавливания дислокаций преципитатами, т.е. когда от преципитата отходили одна-три полных призматических дислокационных петли.

Средний размер, на который распространяются призматические дислокационные петли и которые образуют вместе с преципитатом размера 60 nm линейные преципитат-дислокационные скопления, составляет 2–3 μm .

Результаты испытаний приведены в табл. 3, в которой через $\sigma_{33}^{\text{appl}}$ обозначены растягивающие напряжения, действующие в месте расположения преципитата. В правой

Таблица 3. Результаты эксперимента: диапазон размеров наблюдаемых преципитатов и соответствующий диапазон растягивающих напряжений

| № п/п | Размер преципитата $(4\pi/3)^{1/3} a_1$, nm | Растягивающие напряжения $\sigma_{33}^{\text{appl}}$, действующие в месте расположения преципитата, МПа |
|--------------------------|--|--|
| Когерентный преципитат | | |
| 1 | 15 | 396–437(417) |
| Некогерентный преципитат | | |
| 2 | 20–25 | 333 |
| 3 | 30–35 | 250–312(281) |
| 4 | 50 | 166–187(176) |

Примечание. В скобках указаны значения напряжений, использованные при расчете.

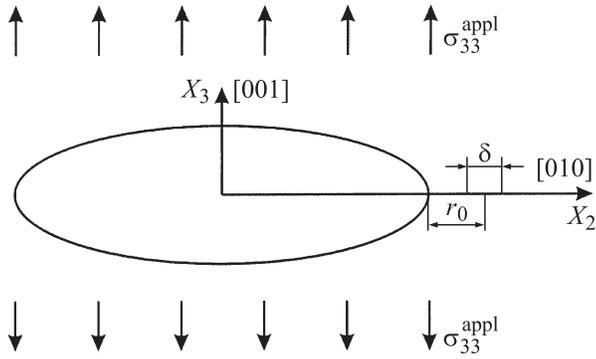


Рис. 7. Геометрическая модель преципитат-дислокационного скопления. Оси декартовой системы координат совпадают с осями кубической ячейки кристалла кремния.

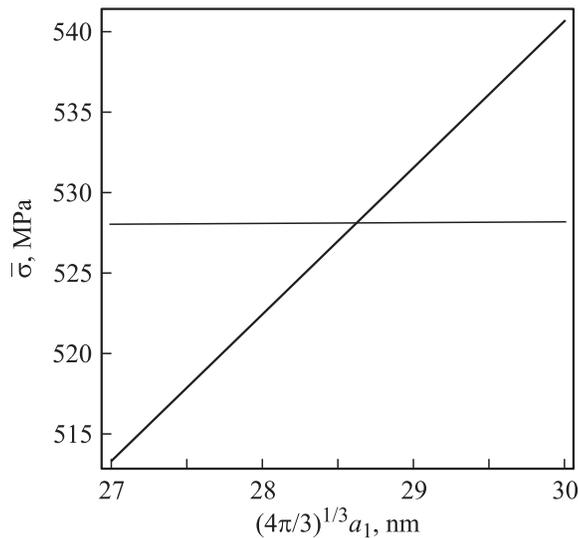


Рис. 8. Зависимость среднего напряжения $\bar{\sigma}$ от параметра $(4\pi/3)^{1/3}a_1$.

колонке приводятся значения размера преципитата, при котором происходит образование дислокационной петли несоответствия (когерентный преципитат) и начало призматического выдавливания дислокационных петель внедрения (некогерентный преципитат).

Проведем модельный расчет для определения характеристик материала $\bar{\sigma}_{cr}^{nuc}$ и $\bar{\sigma}_{cr}^{mov}$. При моделировании будем считать, что дислокационная петля образуется на расстоянии $r_0 = 5$ межатомных расстояний от поверхности преципитата, а область δ имеет размер трех межатомных расстояний (рис. 7). Другой выбор величин r_0 и δ приведет к другим значениям $\bar{\sigma}_{cr}^{nuc}$ и $\bar{\sigma}_{cr}^{mov}$, однако отношение между ними останется прежним. Поэтому к величинам $\bar{\sigma}_{cr}^{nuc}$ и $\bar{\sigma}_{cr}^{mov}$ следует относиться не как к истинным характеристикам материала, а как к некоторым параметрам, позволяющим провести сопоставление поведения преципитатов разной геометрии и при различных условиях нагружения.

После сделанных замечаний перейдем к определению величин $\bar{\sigma}_{cr}^{nuc}$ и $\bar{\sigma}_{cr}^{mov}$. С этой целью используем значения a_1 , σ_{33}^{appl} первого и второго испытаний соответственно (табл. 3). При этом для нахождения $\bar{\sigma}$ используются формулы (4), (18) и (40). Результаты модельного расчета следующие:

$$\bar{\sigma}_{cr}^{nuc} = 487 \text{ МПа}, \quad \bar{\sigma}_{cr}^{mov} = 528 \text{ МПа}. \quad (43)$$

Исходя из полученного значения $\bar{\sigma}_{cr}^{mov}$, вычислим радиус преципитата, при котором начинается движение полной дислокационной петли внедрения в случае, если $\sigma_{33}^{appl} = 281 \text{ МПа}$ (табл. 3). Для этого по формулам (4), (18) и (40) построим график зависимости $\bar{\sigma}$

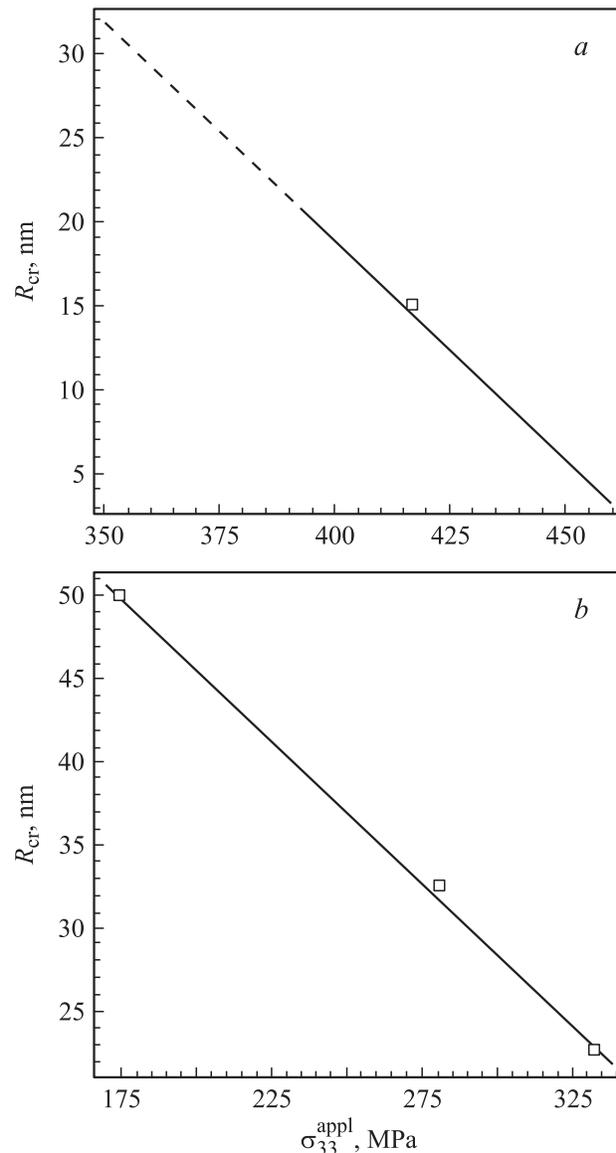


Рис. 9. Зависимость критического радиуса преципитата R_{cr} от величины приложенных напряжений σ_{33}^{appl} в критическом состоянии. *a* — возникновение петли несоответствия, *b* — страгивание петли внедрения. Точками обозначены экспериментальные значения.

от $(4\pi/3)^{1/3}a_1$ (рис. 8). Точка пересечения построенного графика с прямой $\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_{cr}^{mov}$ является искомым критическим радиусом R_{cr} . Модельный расчет дает для него значение 28.6 nm.

Отличие полученного результата от экспериментального значения (30–35 nm) связано с завышенной оценкой собственных деформаций ε^0 . Получим более точную оценку ε^0 и критического радиуса R_{cr} . Для этого можно поступить следующим образом. Будем считать неизвестными не только $\bar{\sigma}_{cr}^{nuc}$, $\bar{\sigma}_{cr}^{mov}$, но и ε^0 . После этого рассчитаем по результатам второго и четвертого испытаний $\bar{\sigma}$, зависящее от собственных деформаций ε^0 . Так как величина $\bar{\sigma}_{cr}^{mov}$ считается постоянной, полученные выражения должны совпадать. Из этого равенства определим ε^0 . Далее, как и раньше, найдем $\bar{\sigma}_{cr}^{nuc}$ и $\bar{\sigma}_{cr}^{mov}$. Результаты расчета следующие:

$$\varepsilon^0 = 0.044, \quad \bar{\sigma}_{cr}^{nuc} = 465 \text{ МПа}, \quad \bar{\sigma}_{cr}^{mov} = 467 \text{ МПа}. \quad (44)$$

Новая оценка собственных деформаций, как и ожидалось, меньше, чем оценка, полученная ранее. Относительная ошибка при сделанной выше в разделе 5 качественной оценке составила 32%. Тот факт, что величины $\bar{\sigma}_{cr}^{nuc}$ и $\bar{\sigma}_{cr}^{mov}$ оказались практически равными, позволяет сделать предположение, что процессы образования дислокационной петли несоответствия и начала движения дислокационной петли внедрения происходят одновременно.

Используем новые значения ε^0 , $\bar{\sigma}_{cr}^{nuc}$ и $\bar{\sigma}_{cr}^{mov}$ для определения в рамках предложенной модели радиуса precipitata, при котором образуется дислокационная петля несоответствия, а также начинает движение полная дислокационная петля внедрения, считая заданным приложенное к образцу напряжение σ_{33}^{app} . Полученные результаты приведены на рис. 9.

Полученные графики согласуются с экспериментальными данными, приведенными в табл. 3.

8. Заключение

Рассмотрена модель когерентного и некогерентного кислородсодержащего precipitata, образующегося в анизотропном кристалле кремния в результате распада пересыщенного твердого раствора кислорода. На основе классического подхода Эшелби определены напряжения, действующие внутри и вне precipitata.

Предложена методика оценки собственных деформаций precipitata из анализа precipitat-дислокационных скоплений, возникающих на поздних стадиях многоступенчатой термической обработки кремниевых пластин. Полученная качественная оценка используется для определения количества содержащегося в precipitate вещества.

Предложен критерий зарождения дислокации несоответствия и начала движения полной дислокационной петли внедрения, лежащей в плоскости precipitata. В качестве физической основы критерия образования

дислокационной петли принята концепция, близкая к концепции Нейбера–Новожилова, согласно которой петля образуется, если напряжения в некоторой области вблизи precipitata достигают критического значения. Значения этих напряжений считаются не зависящими от свойств precipitata и приложенных нагрузок и рассматриваются как параметры, позволяющие провести сравнение поведения precipitates разной геометрии при разных условиях нагружения.

В рамках предложенных модели precipitata и критериев проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. Полученное соответствие свидетельствует о надежности сделанной оценки собственных деформаций и позволяет использовать предложенную методику для прогнозирования поведения precipitates с произвольными геометрическими характеристиками. С учетом сделанных оценок предложенный методический подход позволяет в корректной форме учесть влияние параметров precipitates и внешних механических напряжений на генерацию дислокаций кислородсодержащими precipitataми.

9. Приложение. Выражения для компонент тензора Эшелби в случае кубической анизотропии

Приведем выражения для тензора Эшелби в случае кубической симметрии кристалла [8]

$$S_{ijkl} = \frac{1}{8\pi} C_{klpq}^0 (\bar{G}_{ipjq} + \bar{G}_{jpiq}),$$

где компоненты тензора \bar{G}_{ijkl} даются следующими формулами:

$$\begin{aligned} \bar{G}_{1111} = \bar{G}_{2222} &= \frac{2\pi}{a} \int_0^1 \frac{(1-x^2)}{pq} (1-x^2 + \rho^2 x^2) \\ &\times [\mu^2(1-x^2 + \rho^2 x^2) + \beta \rho^2 x^2] dx, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{G}_{3333} &= \frac{4\pi}{a} \int_0^1 \frac{\rho^2 x^2}{pq} (1-x^2 + \rho^2 x^2) [\mu^2(1-x^2 + \rho^2 x^2) \\ &+ \beta(1-x^2)] dx + \frac{\pi\gamma}{a} \int_0^1 \frac{\rho^2 x^2(1-x^2)^2}{p(p+q)} dx, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{G}_{1122} = \bar{G}_{2211} &= \frac{2\pi}{a} \int_0^1 \frac{(1-x^2)}{pq} \{ (1-x^2 + \rho^2 x^2) \\ &\times [\mu^2(1-x^2 + \rho^2 x^2) + \beta \rho^2 x^2] \\ &+ (1-x^2) [\beta(1-x^2 + \rho^2 x^2) + \gamma \rho^2 x^2] \} dx \\ &- \frac{\pi}{a} \int_0^1 \frac{(1-x^2)^2}{p(p+q)} [\beta(1-x^2 + \rho^2 x^2) + \gamma \rho^2 x^2] dx, \end{aligned}$$

$$\bar{G}_{1133} = \bar{G}_{2233} = \frac{2\pi}{a} \int_0^1 \frac{\rho^2 x^2}{pq} \{2(1-x^2 + \rho^2 x^2) \times [\mu^2(1-x^2 + \rho^2 x^2) + \beta \rho^2 x^2] + (1-x^2)[\beta(1-x^2 + \rho^2 x^2) + \gamma \rho^2 x^2]\} dx,$$

$$\bar{G}_{1212} = -\frac{\pi(\lambda + \mu)}{a} \times \int_0^1 \frac{(1-x^2)^2}{p(p+q)} [\mu^2(1-x^2 + \rho^2 x^2) + \mu' \rho^2 x^2] dx,$$

$$\bar{G}_{1313} = \bar{G}_{2323} = -\frac{2\pi\mu(\lambda + \mu)}{a} \times \int_0^1 \frac{\rho^2 x^2(1-x^2)(1-x^2 + \rho^2 x^2)}{pq} dx - \frac{\pi\mu'(\lambda + \mu)}{a} \int_0^1 \frac{\rho^2 x^2(1-x^2)^2}{p(p+q)} dx,$$

$$\bar{G}_{3311} = \bar{G}_{3322} = \frac{2\pi}{a} \int_0^1 \frac{(1-x^2)}{pq} (1-x^2 + \rho^2 x^2) \times [\mu^2(1-x^2 + \rho^2 x^2) + \beta(1-x^2)] dx + \frac{\pi\gamma}{2a} \int_0^1 \frac{(1-x^2)^3}{p(p+q)} dx,$$

где

$$\rho = \frac{a_1}{a_3},$$

$$a = \mu^2(\lambda + 2\mu + \mu'),$$

$$b = a^{-1}\mu\mu'(2\lambda + 2\mu + \mu'),$$

$$c = a^{-1}\mu'^2(3\lambda + 3\mu + \mu'),$$

$$\beta = \mu(\lambda + \mu + \mu'),$$

$$\gamma = \mu'(2\lambda + 2\mu + \mu'),$$

$$p = \{(1-x^2 + \rho^2 x^2)^3 + b\rho^2 x^2(1-x^2)(1-x^2 + \rho^2 x^2) + \frac{1}{4}(1-x^2)^2[b(1-x^2 + \rho^2 x^2) + c\rho^2 x^2]\}^{1/2},$$

$$q = \{(1-x^2 + \rho^2 x^2)^3 + b\rho^2 x^2(1-x^2)(1-x^2 + \rho^2 x^2)\}^{1/2},$$

$$\lambda = C_{12},$$

$$\mu = C_{44},$$

$$\mu' = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}.$$

Список литературы

- [1] R. Falster. Semiconductor fabtech. 13th ed. ICG Publ., London (2001). P. 187.
- [2] В.Т. Бублик, С.Ю. Мацнев, К.Д. Щербачев, М.В. Меженный, М.Г. Мильвидский, В.Я. Резник. ФТТ **45**, 1825 (2003).
- [3] М.В. Меженный, М.Г. Мильвидский, В.Ф. Павлов, В.Я. Резник. ФТТ **44**, 1230 (2002).
- [4] A. Bourret, J. Thibault-Desseaux, D.N. Seidman. J. Appl. Phys. **55**, 825 (1984).
- [5] T.Y. Tan, W.K. Tice. Phil. Mag. **34**, 615 (1976).
- [6] А.Л. Колесникова, А.Е. Романов, В.В. Чалдышев. ФТТ **49**, 633 (2007).
- [7] Дж. Эшелби. В кн.: Континуальная теория дислокаций. ИЛ, М. (1963). С. 103.
- [8] T. Mura. Micromechanics of defects in solids. Martinus Nijhoff Publ., Dorderchet (1987). 588 p.
- [9] A.D. Andreev, J.R. Downes, D.A. Faux, E.P. O'Reilly. J. Appl. Phys. **86**, 297 (1999).
- [10] И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг. ЖЭТФ **17**, 783 (1947).
- [11] R.R. Castles, T. Mura. J. Elast. **15**, 27 (1985).
- [12] J.J. Wortman, R.A. Evans. J. Appl. Phys. **36**, 153 (1964).
- [13] L. Levien, C.T. Prewitt, D.J. Weidner. Am. Mineralog. **65**, 920 (1980).
- [14] Ж. Фридель. Дислокации. Мир, М. (1967). 644 с.
- [15] Р.В. Гольдштейн, К.Б. Устинов, М.В. Меженный, В.Я. Резник. В сб.: Материалы 6-й Междунар. конф. „Рост монокристаллов и тепломассоперенос“(ICSC-05). Обнинск, Россия (2005). С. 656.
- [16] Р.В. Гольдштейн, К.Б. Устинов, П.С. Шушпанников, М.В. Меженный, М.Г. Мильвидский, В.Я. Резник. Препринт ИПМех РАН № 808. М. (2007). 30 с.
- [17] Р.В. Гольдштейн, К.Б. Устинов, П.С. Шушпанников, М.В. Меженный, М.Г. Мильвидский, В.Я. Резник. Письма в ЖТФ **34**, 32 (2008).
- [18] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 599 с.
- [19] К. Теодосиу. Упругие модели дефектов в кристаллах. Мир, М. (1985). 352 с.
- [20] H. Neuber. Report AFML-TR6820. Technische Hochschule, Munich (1967). 32 p.
- [21] В.В. Новожилов. ПММ **33**, 212 (1969).
- [22] K.H. Yang. J. Electrochem. Soc. **131**, 1140 (1984).