УДК 548 4 : 621.315.592

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИЙ ОБРАЗОВАНИЯ И МИГРАЦИИ ПЕРЕГИБА ПО ДАННЫМ О ПОДВИЖНОСТИ ДИСЛОКАЦИЙ В InSb

А. А. Жигалко

Уточняется развитая ранее теория подвижности дислокации в решетке с большими барьерами Пайерлса для случая относительно небольшой энергии перегиба. Полученные соотношения можно использовать для приближенной оценки энергии образования U_0 и миграции W_m перегиба по данным о подвижности длинных дислокаций в достаточно совершенных кристаллах. Применительно к InSb получено: $U_0 \sim 0.1$, 0.2 эВ, $W_m \sim 0.7$, 0.8 эВ у α- и β-дислокаций соответственно. Малым U_0 отвечают более широкий спектр значений m в соотношении $v \propto \sigma^m$ и более узкий интервал напряжений σ, при которых теория справедлива.

По существующим представлениям [1] дислокации в полупроводниках имеют большую энергию перегиба $U_0 \sim 1\div2$ эВ и низкий барьер Пайерлса второго рода $W_{P2} \sim 0.05\div0.15$ эВ. В пользу первого говорят соотношение между U_0 и барьером первого рода W_{P1} в одномерном пайерлсовском рельефе ($W_{P1}=2U_0$) [2] и оценка W_{P1} из зависимости энергии активации дислокации W от напряжения σ [3, 4], в пользу второго — низкоэнергетические пики внутреннего трения в пластически деформированных полупроводниках [5, 6], а также оценки $W_{P2} \sim 0.04$ эВ (Si, Ge), выполненные в [7] для атомной модели перегиба.¹ Учет двумерности реального рельефа, однако, показывает [8], что W_{P2}, возможно, значительно выше² (а U_0, следовательно, ниже, поскольку $U_0 \leqslant W - W_{P2}$ [9]). Об этом могут свидетельствовать также большое $W_m \approx 1.8$ эВ в Si [12] и малая диффузионная длина L_0 двойного перегиба (ДП) в Si ($\sim$0.4 мкм, $T=793\div888$ K, $\sigma=240$ МПа [13]) и Ge (0.3—0.5 мкм, $T=678\div703$ K, $\sigma=35\div40$ МПа [14]), которой отвечают [9] значения $U_0 \approx 0.4$ эВ (Si) и $U_0 \approx 0.5\div0.55$ эВ (Ge) [14]. Предполагается [12], что отклонение реальных U_0 и W_m в Si от теоретических вызвано взаимодействием перегибов с точечными дефектами [15–17]. В то же время возможность аналогичного объяснения малости L_0 в InSb (у β-дислокаций 1 мкм $\leqslant L_0 <$ 300 мкм, $T=453$ K, $\sigma=50$ МПа [4, 18]; у α-дислокаций $L_0 <$ 300 мкм, $T=348\div573$ K, $\sigma=0.5\div50$ МПа [4, 19]; теоретическое $L_0 \sim 10$ м [4, 9]) вызывает сомнение. Дело в том, что в нелегированном InSb не наблюдают [4, 19] наличия у дислокаций стартового напряжения — характерного признака взаимодействия дислокации с точечными дефектами в Si, Ge, GaAs [16]. Это позволяет надеяться, что U_0, определенное по данным о подвижности дислокаций, в InSb близко к значению U_0 в идеальном кристалле.

Согласно [9], U_0 можно найти либо по известному L_0, либо если сопоставить скорости v длинной ($L \gg L_0$, $v(L)=\text{const}$) и короткой ($L \leqslant L_0$,

---

¹ Заметим, однако, что полученные в [7] оценки $W_{P1} \sim 0.23\div0.27$ эВ ставят под сомнение справедливость развитого в [7] подхода.

² Согласно [8], $W_{P2} \propto \exp\{-(4\,G/\sigma_P)^{1/2}\}$ (G — модуль сдвига, σ_P — напряжение Пайерлса). В полупроводниках $\sigma_P \sim (1\div6)\cdot10^9$ Па [3, 4], а, например, в Cu $\sigma_P \leqslant$ $\leqslant 10^6$ Па [10] и $W_{P2} \approx 0.08$ эВ [11].

$v \backsim L$) дислокаций, как это сделано для Si и Ge в [14]. Поскольку данные о L_0 и v коротких дислокаций получают сегодня только с помощью просвечивающей электронной микроскопии [13, 14, 18], нельзя исключать, что U_0, вычисляемое по этим данным, обусловлено взаимодействием перегибов с допороговыми радиационными дефектами.[3] Во втором способе дополнительным источником ошибки может оказаться неучтенный вклад в подвижность длинной дислокации механизма приповерхностной генерации одиночных перегибов (ОП). Этими обстоятельствами объясняется актуальность предпринимаемой в настоящей работе попытки оценить U_0 непосредственно по данным о подвижности длинных α- и β-дислокаций в InSb [4, 19], учтя при этом возможный вклад ОП.

Скорость длинной ($L \gg L_0$) дислокации, согласно [9], связана с U_0 и W_m соотношением $v \backsim \exp\{-(U_0+W_m)/T\}$, не позволяющим раздельно определить U_0 и W_m. Это затруднение, однако, можно попытаться обойти, учтя зависимость от U_0 нормировочной постоянной A в выражении для функции распределения $f(l, t)$ случайной длины l ДП докритических размеров ($l \leqslant l_c$). В [9] принималось $A \sim b^{-1}$ ($\mathbf{b}$ — вектор Бюргерса), что справедливо, например, при дискретном спектре метастабильных состояний ДП $l_k = kb$ ($k=0, \pm 1, \pm 2, \ldots$; $k<0$ у ДП, выброшенного в направлении, противоположном $\mathbf{v}$) и малой суммарной вероятности неосновных ($k \neq 0$) и промежуточных ($l \neq l_k$) состояний. В противном случае A может существенно зависеть от U_0. Например, при низком вторичном рельефе ($W-T \leqslant U_0 \leqslant W$) и монотонном возрастании энергии ДП $U(l)$ в окрестности $l=0$ или при больших W_{P1} и W_{P2} и не слишком быстром росте $U(l_k)$ в окрестности $l=0$, что возможно при небольших U_0. В последнем случае диффузионная теория [9] нуждается в некоторых уточнениях.

1. Темп генерации закритических ДП при небольших U_0

Эволюция ДП, порождаемого некоторым произвольным элементарным участком $[x, x+b]$ прямолинейной дислокации, описывается уравнениями

$$\frac{\partial}{\partial t} f(l, t) = -\frac{\partial}{\partial l} j(l, t), \tag{1}$$

$$j(l, t) = f(l, t) w(l) - \frac{\partial}{\partial l} \{D(l) f(l, t)\}, \tag{2}$$

$$f(l, 0) = \delta(l), \tag{3}$$

где $\delta(l)$ — дельта-функция Дирака, w — скорость расширения ДП, D — коэффициент диффузии случайного l

$$w(l) = -2nb\nu_0 \exp(-W_m/T) \operatorname{sh}\{b(\partial\mathcal{F}/\partial l)/2T\}, \tag{4}$$

$$D(l) = nb^2\nu_0 \exp(-W_m/T) \exp\{b(\partial\mathcal{F}/\partial l)/2T\}, \tag{5}$$

n — количество перегибов в ДП; $\mathcal{F}(l) = U(l) - \sigma bal$; $U(l)$ — нижняя огибающая осциллирующей (в двумерном рельефе) по l энергии ДП; a — период рельефа в направлении $\mathbf{v}$; ν_0 — максимальная частота термических колебаний перегиба. Предполагается, что $W_m = W_{P2} \gtrsim |\sigma ba - U'(l)| b$, так что зависимостью W_m от σ и l можно пренебречь. Предполагается, что W_{P1} достаточно высок и удерживает дислокацию от непосредственного перехода из одной долины в другую. Момент $t=0$ соответствует перебросу рассматриваемого сегмента дислокации в очередную долину каким-либо расширяющимся закритическим ($l \geqslant l_c$) ДП. Для определенности «за-

---

[3] При облучении InSb электронами радиационное дефектообразование наблюдается уже при энергиях $\sim$20 кэВ [20], много меньших, чем при электронной микроскопии InSb (200 кэВ [18]).

«критическим» будем считать ДП, достигший такой длины l, при которой вероятность его возвращения в основное состояние $p(l)$ меньше e^{-1}.

«Растекание» $f(l, t)$ из состояния (3) происходит условно в два этапа. На первом этапе в течение некоторого времени τ_0 растекание вероятности происходит в пределах области $\Omega \equiv \{l < \bar{l} = l_c + \Delta l_c\}$ (Δl_c выбирается для определенности так, чтобы $p(\bar{l}) = e^{-1} p(l_c)$). На втором этапе вероятность утекает из Ω в квазистационарном режиме

$$f(l, t) \equiv 0, \quad l > \bar{l}, \quad t \leqslant \tau_0,$$

$$f(l, t) \approx f_0(l)\,\eta(l) \exp\{-(t-\tau_0)/\tau\}, \quad l < \bar{l}, \quad t \geqslant \tau_0, \tag{6}$$

$$\eta(0) = 1. \tag{7}$$

Здесь $f_0(l)$ — больцмановская функция распределения

$$f_0(l) = A \exp\{-\mathscr{F}(l)/T\}, \tag{8}$$

A определяется нормировкой $f(l, t)$ на 1 или условием

$$\int\limits_{\Omega} f_0(l)\,\eta(l)\,dl \approx 1. \tag{9}$$

Подставляя (6) в (2) и интегрируя (1) дважды по l, получим с учетом (7)

$$1 - \eta(l) = \tau^{-1} \int\limits_0^l dl' \frac{1}{D(l') f_0(l')} \int\limits_{-\infty}^{l'} dl'' f_0(l'')\,\eta(l''). \tag{10}$$

Приближение «точечных» перегибов $U(l) = 2U_0 - \alpha b / |l|$ ($|l| \gg a$) [21] доопределим для $l \sim a$ так, чтобы $U = 0$ в отсутствие ДП (при $l = 0$)

$$U(l) = 2U_0 - \alpha b/(l_0 + |l|), \quad l_0 = b\alpha/2U_0. \tag{11}$$

Строгих оснований такой прием, конечно, не имеет, но как средство получения грубой оценки U_0 может быть оправдан.

При не слишком больших l_c ($\sigma > \sigma_*$, σ_* определяется условием (24)) вероятность, распределенная в узкой области $\Omega' \equiv \{|l| \leqslant l_1 = b\alpha T/U_0^2\}$, существенно выше при $t = \tau_0$ вероятности, распределенной вне Ω', а $f(l, \tau_0)$ в пределах Ω' близко к (8). В этом случае A почти не зависит от σ, а интеграл по l'' в (10) можно заменить единицей (что равносильно приближению постоянного тока в Ω). Тогда

$$\tau \approx \int\limits_0^{\bar{l}} \{D(l) f_0(l)\}^{-1} dl \approx \int\limits_0^{\infty} \{D(l) f_0(l)\}^{-1} dl, \tag{12}$$

$$\eta(l) \approx 1 - \tau^{-1} \int\limits_0^l \{D(l') f_0(l')\}^{-1} dl', \quad l \geqslant l_1, \tag{13}$$

$$A \approx A_0 = \left(\int\limits_{\Omega'} \exp\{-\mathscr{F}(l)/T\}\,dl \right)^{-1} \approx 2\frac{U_0^2}{aT} b^{-1}. \tag{14}$$

Из (12) и (13) видно, что $\eta(l)$ имеет смысл вероятности возвращения ДП длиной l в основное состояние. Следовательно, l_c — корень уравнения $\eta(l_c) = e^{-1}$. Несложно убедиться в том, что учет зависимости $D(l)$ (5) приводит к относительной поправке γ к τ, вычисленному в приближении $D(l) \equiv D(l \to \infty) = 2b^2 \nu_0 \exp(-W_m/T)$

$$\tau|_{D=D(l)} = (1+\gamma)\,\tau|_{D=\mathrm{const}}, \quad \gamma \sim (\exp[\sigma b^2 a/2T] - 1)/2.$$

Ограничимся исследованием характерной экспериментальной ситуации $\sigma b^2 a \leqslant T$. Здесь γ мало и зависимостью $D(l)$ можно пренебречь. Тогда

$$\tau \approx \nu_0^{-1} \frac{\alpha T}{2U_0^2} \exp\left\{\frac{W_m + 2U_0}{T}\right\} \left(\frac{\alpha}{\sigma b^2 a}\right)^{1/2} K_1\left(\left[\frac{\sigma}{\sigma_0}\right]^{1/2}\right), \quad \sigma_0 = \frac{T^2}{4\alpha b^2 a}, \tag{15}$$

$$\eta(l) = 1 - \frac{Q_l}{Q_\infty}, \quad l \geqslant l_1;$$

$$Q_l = \int_0^l \exp\left\{-\frac{\sigma b a l + \alpha b/(l + l_0)}{T}\right\} dl; \quad Q_\infty = Q_l|_{l=\infty}, \tag{16}$$

K_1 — функция Макдональда. Соотношение (15) получено в приближении $l_0 \ll l_c$ и отличается от аналогичного в [9] множителем $(A_0 b)^{-1}$ и более узким интервалом применимости ($\sigma_* \leqslant \sigma \leqslant T/b^2 a$). В одномерном рельефе ($W_m \to 0$, $U_0 \approx W \sim 1 \div 2$ эВ, $\alpha \sim 0.5$ эВ, $T \sim 0.05$ эВ) эта поправка уменьшает τ в сотни раз, а в двумерном (небольшие U_0) может быть использована для оценки U_0 по данным о подвижности дислокации.

При больших σ ($\sigma \geqslant \Xi\sigma_0$)[4] получаем из (15) и (16)

$$\tau \approx \frac{\pi^{1/2}}{4} \nu_0^{-1} \frac{\alpha^{5/4}}{U_0^2} \frac{T^{3/2}}{(\sigma b^2 a)^{3/4}} \exp\left\{\frac{W_m + 2U_0 - 2(\alpha\sigma b^2 a)^{1/2}}{T}\right\}, \tag{17}$$

$$\eta(l) \approx \begin{cases} 1, \ 0 < \bar{l} \leqslant 1 - \Delta\bar{l}_c, \ \bar{l} \equiv l/l_c^*, \quad \Delta\bar{l}_c \equiv \Delta l_c/l_c^* = \tilde{\sigma}^{-1/4}, \quad \tilde{\sigma} \equiv \sigma/4\sigma_0, \\ 1/2 - \pi^{-1/2}(\bar{l} - 1)/\Delta\bar{l}_c, \ |\bar{l} - 1| \leqslant \Delta\bar{l}_c, \\ \pi^{-1/2}\tilde{\sigma}^{-1/4} \exp\{-\tilde{\sigma}^{1/2}(\bar{l} - 1)\}, \ \bar{l} \geqslant 1 + \Delta\bar{l}_c, \end{cases} \tag{18}$$

$$l_c \approx l_c^* + \omega\Delta l_c, \quad \omega = \pi^{1/2}(1/2 - 1/e) \approx 0.234, \quad l_c^* \approx b(\alpha/\sigma b^2 a)^{1/2}. \tag{19}$$

Справедливость соотношений (15), (17)—(19) ограничивается сверху напряжением σ_{**}, определяемым соотношениями

$$\sigma_{**} = 4\sigma_0\tilde{\sigma}_{**}, \quad \tilde{\sigma}_{**} = \min\left\{\frac{\alpha}{T}, \ \tilde{\sigma}_1\right\}, \quad \tilde{\sigma}_1 = \left\{2\frac{U_0}{T}\left(1 - \frac{1-\omega}{\tilde{\sigma}_1^{1/4}}\right)\right\}^2, \tag{20}$$

где σ_1 — напряжение, при котором $l_c - \Delta l_c = l_0$; α/T — относительное напряжение, выше которого приближение $D = \text{const}$ несправедливо.

При малых σ ($\sigma_* \leqslant \sigma \leqslant \theta\sigma_0$)[4]

$$\tau \approx \frac{1}{4} \nu_0^{-1} \frac{\alpha}{U_0^2} \frac{T^2}{\sigma b^2 a} \exp\left\{\frac{W_m + 2U_0}{T}\right\}, \tag{21}$$

$$\eta(l)|_{l \leqslant l_c^*} \approx 1, \quad \eta(l)|_{l \geqslant l_c^*} \approx \exp\{-l/l_c\}, \tag{22}$$

$$l_c \approx b(T/\sigma b^2 a), \quad \Delta l_c \approx l_c. \tag{23}$$

При $\sigma = \sigma_*$ имеем (по определению σ_*)

$$\int_{l_1}^{l} \exp\left\{-\frac{\mathcal{F}(l)}{T}\right\} \eta(l)\, dl = \frac{1}{2} A_0^{-1},$$

откуда с учетом (14), (22) и (23) находим

$$\sigma_* \approx (8U_0^2/\alpha b^2 a) \exp\{-2U_0/T\}. \tag{24}$$

Область температур, в которой соотношения (21)—(23) несправедливы ни при каких σ, определяется условием $\theta\sigma_0 \leqslant \sigma_*$ или

$$(2U_0/T)^2 \exp(-2U_0/T) \geqslant \theta/8 \to T \geqslant U_0/4, \quad \theta = 1/4. \tag{25}$$

---

[4] Можно для определенности принять $\Xi = \theta^{-1} = 4$. При этом относительная ошибка в (17) и (21) $\sim 1/4$ при $\sigma = \Xi\sigma_0$ и $\sigma = \theta\sigma_0$.

Время установления квазистационарного режима равно с учетом (9)

$$\tau_0 \approx \int_0^l \frac{f_0(l)\,\eta(l)}{j_*(l)}\,dl = \tau\int_0^l f_0(l)\,\eta(l)\,[1-\eta(l)]\,dl, \quad j_*(l)\approx\left\{\int_0^l \frac{dl'}{Df_0(l')}\right\}, \tag{26}$$

где $j_*(l)$ — ток через границу области растекания вероятности $\{0 < l' < l\}$, вычисленный в приближении своего постоянства в пределах этой области. При больших и малых σ из (18), (19), (26) и (22), (23), (25), (26) имеем соответственно

$$\tau_0 \approx \frac{1}{2}\tau\tilde{\sigma}^{-3/4}\left(\frac{2U_0}{T}\right)^2 \exp\left\{-\frac{2U_0}{T}+2\tilde{\sigma}^{1/2}\right\}, \quad 1 \leqslant \tilde{\sigma} \leqslant \tilde{\sigma}_{**}, \tag{27}$$

$$\tau_0 \approx 4\tau(\sigma/\sigma_0)^{-1}(2U_0/T)^2\exp(-2U_0/T), \quad \sigma_* \leqslant \sigma \leqslant \theta\sigma_0, \quad T \leqslant U_0/4. \tag{28}$$

Темп генерации закритических ДП рассматриваемым элементарным участком дислокации без учета взаимодействия с другими ДП равен $\tau_g^{-1} = (\tau_0+\tau)^{-1}$.

2. Подвижность дислокации, определяемая двойными перегибами

Среднее (по ансамблю индивидуальных дислокаций длиною L) количество закритических ДП на дислокации $N(t)$ удовлетворяет уравнениям

$$\frac{dN}{dt} = \frac{L}{\Delta x}\frac{1}{\tau_g}\frac{(\tau_1-\tau_0)}{\tau_1}\chi\{\tau_1>\tau_0\} - \frac{N}{\tau_1}, \quad N \geqslant 1, \tag{29}$$

$$\frac{dN}{dt} \approx \frac{L}{\Delta x}\frac{1}{\tau_g} - \frac{N}{\tau_1}, \quad N \leqslant 1, \tag{30}$$

где $L/\Delta x$ — количество мест возможного зарождения ДП; τ_1 — время жизни закритического ДП; множитель $(\tau_1-\tau_0)/\tau_1$ в (29) введен для учета «сбрасывания» распределения $f(l, t)$ в состояние (3) потоком через сегмент $[x, x+\Delta x]$ перегибов, принадлежащих закритическим ДП; $\chi\{\cdots\}$ — индикатор условия $\{\cdots\}$. Положим $\Delta x = b$ [21]. Выбор $\Delta x = l_c$ [9] (для упрощенного учета взаимодействия докритических перегибов) можно было бы отчасти оправдать, если бы «дорастание» ДП до критических размеров происходило монотонно. В зависимости от преобладающего способа аннигиляции перегибов (при $N \leqslant 1$ — на поверхности кристалла, при $N \geqslant 2$ — взаимная) имеем $\tau_1 \approx L/\bar{w}$, $N \leqslant 1$ либо $\tau_1 \approx L/N\bar{w}$, $N \geqslant 2$. Здесь $\bar{w}$ — постоянная (для простоты) скорость расширения закритических ДП

$$w(l)\big|_{l \geqslant l} \approx \bar{w} = w(l)\big|_{l \gg l_c} = 2b\nu_0 T^{-1}\sigma b^2 a \exp(-W_m/T). \tag{31}$$

Стационарные ($dN = 0$) решения уравнений (29) и (30) отвечают установившейся скорости дислокации

$$v = b\bar{w}\frac{N}{L} \approx \begin{cases} 2b\tau_0^{-1}(1+[1+4b\tau_g/\bar{w}\tau_0^2]^{1/2})^{-1}, & L \geqslant 2L_0\,(N \geqslant 2), \quad (32)\\ L\tau_g^{-1}, \quad L \leqslant L_0\,(N \leqslant 1), & \quad (33)\end{cases}$$

где

$$L_0 = \frac{1}{2}\tau_0\bar{w}\left(1+\left[1+\frac{4b\tau_g}{\bar{w}\tau_0^2}\right]^{1/2}\right). \tag{34}$$

Для целей работы интересен случай $L \gg L_0$. Здесь возникают две характерные ситуации

$$v \approx \begin{cases} (b\bar{w}/\tau_g)^{1/2}, \\ b/\tau_0, \end{cases} \quad L_0 = \frac{L}{N} \approx \begin{cases} (b\bar{w}\tau_g)^{1/2}, & \psi \equiv (\bar{w}\tau_0^2/b\tau_g)^{1/2} \leqslant 1, \\ \tau_0\bar{w}, & \psi \geqslant 2. \end{cases}$$

При $\Xi\sigma_0 \leqslant \sigma \leqslant \sigma_{**}$ с учетом (17), (27) и (31) получим

$$v \approx \begin{cases} \dfrac{2}{\pi^{1/2}} b\nu_0 \dfrac{1}{Ta^{1/2}} (\sigma b^2 a)^{3/2} \exp\left(-\dfrac{W_m}{T}\right), & \psi \geqslant 2, \quad (35) \\ \dfrac{2^{3/2}}{\pi^{1/4}} b\nu_0 \dfrac{U_0}{a^{5/8} T^{5/4}} (\sigma b^2 a)^{7/8} \exp\left\{-\dfrac{W_m + U_0 - (\alpha\sigma b^2 a)^{1/2}}{T}\right\}, & \psi \leqslant 1, \quad (36) \end{cases}$$

$$\psi \approx 2^{1/2}\pi^{1/4} (\alpha/T)^{1/2} (U_0/T) \exp(-U_0/T)\, \tilde{\sigma}^{-5/8} \exp(\tilde{\sigma}^{1/2}), \quad \tilde{\sigma} \equiv \sigma/4\sigma_0,$$

$$L_0 \approx \begin{cases} \pi^{1/2} b (\alpha/\sigma b^2 a)^{1/2} \equiv \pi^{1/2} l_c, & \psi \geqslant 2, \quad (37) \\ 2^{-1/2}\pi^{1/4} b \dfrac{T^{1/4} a^{5/8}}{U_0} (\sigma b^2 a)^{1/8} \exp\left\{\dfrac{1}{T}\left(U_0 - [\alpha\sigma b^2 a]^{1/2}\right)\right\}, & \psi \leqslant 1. \quad (38) \end{cases}$$

При $\sigma_* \leqslant \sigma \leqslant \theta\sigma_0$ с помощью (21), (28), (31) находим

$$v \approx \begin{cases} 2^{3/2} b\nu_0 \dfrac{U_0}{T^{3/2} a^{1/2}} \sigma b^2 a \exp\left\{-\dfrac{W_m + U_0}{T}\right\}, & \psi \leqslant 1, \quad (39) \\ b\nu_0 \left(\dfrac{\sigma b^2 a}{T}\right)^2 \exp\left(-\dfrac{W_m}{T}\right), & \psi \geqslant 2, \quad (40) \end{cases}$$

$$\psi \approx 2^{3/2} (\alpha/T)^{1/2} \tilde{\sigma}^{-1} (U_0/T) \exp(-U_0/T),$$

$$L_0 \approx \begin{cases} 2^{-1/2} b \left(\dfrac{\alpha}{T}\right)^{1/2} \dfrac{\exp(U_0/T)}{(U_0/T)}, & \psi \leqslant 1, \quad (41) \\ 2b \dfrac{T}{\sigma b^2 a}, & \psi \geqslant 2. \quad (42) \end{cases}$$

Соотношения (35), (36), (39), (40) и (37), (38), (41), (42) следуют в порядке убывания σ.

3. Вклад одиночных перегибов в подвижность дислокации

Ограничимся рассмотрением случая нормальной к поверхности кристалла дислокации. Энергия ОП с учетом сил изображения [21] и соотношения (11) равна $U(l) = U_0 - \alpha b/4\,(l_0 + |l|)$, $|l|$ — расстояние от перегиба до поверхности. В формулах (1)—(5) случаю ОП соответствует $n=1$. Таким образом, после подстановки

$$U_0/2 \to U_0, \quad \alpha/4 \to \alpha, \quad \nu_0/2 \to \nu_0 \tag{43}$$

полученные выше для τ, τ_0, τ_g, $\bar{w}$ выражения будут описывать ОП-модель. Аналогом (29), (30) служит уравнение $dN = 2\tau_g^{-1} dt - N\tau_1^{-1} dt$ (если генерация ОП на обоих концах дислокации идет в одинаковом темпе); $\tau_1 \approx L/\bar{w}$ при $N \leqslant 1$, когда ОП аннигилируют на противоположном от места зарождения конце дислокации; $\tau_1 \approx L/2\bar{w}$ при $N \geqslant 2$, когда ОП аннигилируют друг на друге во встречных потоках. Установившаяся ($dN=0$) скорость дислокации

$$v = b\bar{w}\frac{N}{L} = \varkappa b\tau_g^{-1}, \quad \varkappa \approx \begin{cases} 2, & L \leqslant L_0 = \bar{w}\tau_g, \\ 1, & L \geqslant 2L_0. \end{cases} \tag{44}$$

Заметная зависимость v от L будет наблюдаться только в полосе $L_0 \leqslant L \leqslant 2L_0$. Если же ОП генерируются только на одном конце дислокации, то $\varkappa = 1$.

При больших и малых напряжениях из (17), (21), (27), (28), (43), (44) найдем, что $\tau_g \approx \tau$ и

$$
v \approx \begin{cases} \dfrac{2^{3/2}}{\pi^{1/2}}\varkappa b\nu_0 \dfrac{U_0^2}{\alpha^{5/4}} \dfrac{(\sigma b^2 a)^{3/4}}{T^{3/2}} \exp\left\{-\dfrac{W_m+U_0-(\alpha\sigma b^2 a)^{1/2}}{T}\right\}, & \Xi\sigma_0^{(\text{ОП})} \leqslant \sigma \leqslant \sigma_{**}^{(\text{ОП})}, \\ 2\varkappa b\nu_0 \dfrac{U_0^2}{a} \dfrac{\sigma b^2 a}{T^2} \exp\left\{-\dfrac{W_m+U_0}{T}\right\}, & \sigma_*^{(\text{ОП})} \leqslant \sigma \leqslant \theta\sigma_0^{(\text{ОП})}, \end{cases} \tag{45}
$$

где $\sigma_0^{(\text{ОП})} = 4\sigma_0$, $\sigma_*^{(\text{ОП})} = \sigma_* \exp(U_0/T)$, $\sigma_{**}^{(\text{ОП})} \approx \sigma_{**}$.

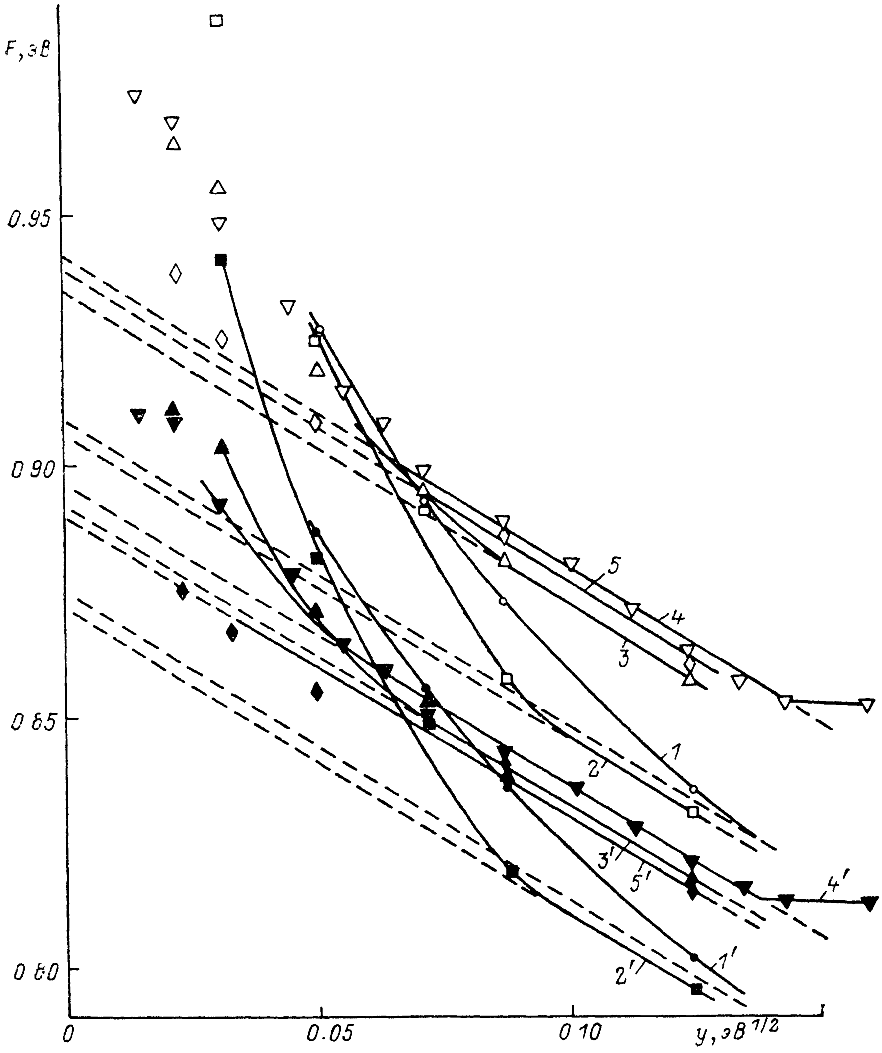

Рис. 1. Зависимости [19] скорости α-дислокаций от приложенного напряжения при разных T в монокристаллах InSb, перестроенные в координатах F, y.

1—5 — модель ОП, *1'—5'* — модель ДП. T (°C): *1*, *1'* — 75; *2*, *2'* — 100; *3*, *3'* — 150; *4*, *4'* — 200; *5*, *5'* — 225.

Соотношение между вкладами ДП и ОП в подвижность дислокации $q = v^{(\text{ДП})}/v^{(\text{ОП})}$ при больших σ имеет вид

$$
q \approx \begin{cases} 2^{-1/2}\varkappa^{-1}\left(\dfrac{T}{U_0}\right)^2 \tilde{\sigma}^{3/4} \exp\left(\dfrac{U_0}{T} - \tilde{\sigma}^{1/2}\right) < \pi^{1/4}\varkappa^{-1}\sigma^{1/8}\dfrac{(\alpha T)^{1/2}}{U_0}, & \psi \geqslant 2, \\ \pi^{1/4}\varkappa^{-1}\tilde{\sigma}^{1/8}(\alpha T)^{1/2}/U_0, & \psi \leqslant 1, \end{cases}
$$

при малых σ

$$q \approx \begin{cases} 2^{1/2}\chi^{-1}\dfrac{(T\alpha)^{1/2}}{U_0}, \quad \theta_1 \leqslant \tilde{\sigma} \leqslant \dfrac{\theta}{4}; \quad \theta_1 = 2^{3/2}\left(\dfrac{\alpha}{T}\right)^{1/2}\left(\dfrac{U_0}{T}\right)\exp\left(-\dfrac{U_0}{T}\right), \\ \dfrac{1}{2}\chi^{-1}\left(\dfrac{T}{U_0}\right)^2\exp\left(\dfrac{U_0}{T}\right)\tilde{\sigma} < 2^{1/2}\chi^{-1}\dfrac{(T\alpha)^{1/2}}{U_0}, \quad \tilde{\sigma}_* \leqslant \tilde{\sigma} \leqslant \theta_1. \end{cases}$$

Отсюда видно, что при небольших U_0 $(U_0 \leqslant (T\alpha/2)^{1/2})$ подвижность дислокации определяется преимущественно ДП, если σ не слишком велико $(\psi \leqslant 1)$ и не слишком мало $(\tilde{\sigma} \geqslant \theta_1)$. Напротив, при больших U_0 $(U_0 \approx W)$ имеем $T \ll U_0^2/\alpha$, следовательно, основной вклад в подвижность делают ОП.

4. Оценка U_0 по данным о подвижности дислокаций в InSb

Воспользуемся данными о подвижности длинных $(L \geqslant 300$ мкм) α-дислокаций в InSb, полученными в работе [19]. Исследованному здесь интервалу температур 348—498 К соответствуют $\sigma_0 = 1.1 \div 2.3$ и $\sigma_0^{(\text{ОП})} = 4.4 \div 9.2$ МПа. Таким образом, исследованный в [19] интервал напряжений 1—49 МПа гарантированно пересекается лишь с областью больших напряжений, где подвижность описывается соотношениями (36) и (45). Перепишем их в виде

$$V(t) - \beta y = F(y),$$
$$y^2 \geqslant \Xi y_0^2, \quad y_0^2 = \sigma_0 b^2 a,$$

где

$$y \equiv (\sigma b^2 a)^{1/2}, \quad \beta = \alpha^{1/2},$$
$$V(T) \equiv W_m + U_0 + T \ln \frac{\beta^{\xi}}{U_0^{\chi}},$$
$$F(y) \equiv T\left(r + 2m \ln \frac{y}{v}\right). \qquad (46)$$

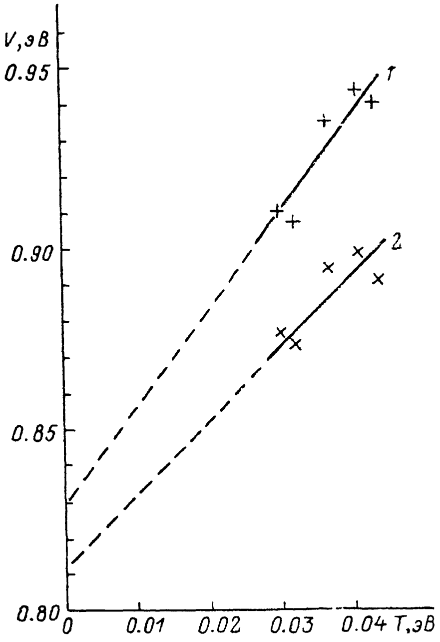

Рис. 2. К процедуре графического определения U_0 и W_m.

1 — модель ОП, *2* — модель ДП.

В ДП-модели $\chi = 1$, $\xi = 5/4$, $r = \ln(2^{3/2}\pi^{-1/4} b\nu_0 T^{-5/4})$, $m = 7/8$. В ОП-модели $\chi = 2$, $\xi = 5/2$, $r = \ln(2^{3/2}\pi^{-1/2} b\nu_0 T^{-3/2})$, $m = 3/4$. Положим $\nu_0 = \nu_D \approx 4 \cdot 10^{12}$ с$^{-1}$ (дебаевская частота). Зависимости $v(\sigma)$ [19] перестроены в координатах y, F на рис. 1.

В ОП-модели зависимости $F(y)$ в интервале $y_0 \leqslant y \leqslant 0.14$ эВ$^{1/2}$ при $T \geqslant 423$ К имеют предсказываемый теорией линейный участок с наклоном, близким к теоретическому, — $\beta \approx 0.63$ эВ$^{1/2}$. При $T = 348$ и $T = 373$ К теория и эксперимент согласуются хуже. Значения $F(y=0) \equiv V(T)$ аппроксимируются линейной по T зависимостью, из которой (рис. 2) с помощью (46) найдем $U_0 \approx 0.14$ эВ и $W_m \approx 0.69$ эВ. В ДП-модели для α-дислокаций имеем $U_0 \approx 0.07$ эВ и $W_m \approx 0.74$ эВ — достоверность этих оценок ниже, что видно из рис. 2 и следует из того, что $q \approx 0.5 \div 0.6$ $(\psi \approx 0.3 \div 0.7)$.

Аналогично обработав данные о $v(\sigma, T)$ β-дислокаций [4], получим $U_0 \approx 0.19$ эВ и $W_m \approx 0.79$ эВ (ОП-модель, $q \approx 0.4 \div 0.5$, $\psi \approx 0.08 \div 0.30$).

5. Обсуждение результатов

Полученные оценки U_0 можно считать справедливыми лишь по порядку величины. Во-первых, это обусловлено известным произволом модельной зависимости $U(l)$. Во-вторых, значения U_0 с трудом удовлетворяют условию «малости» ($U_0 \leqslant \bar{U}_0 = (\alpha T/2)^{1/2}$), при котором $A = A(U_0)$ благодаря тому, что статистическая сумма дискретного распределения длин метастабильных докритических ДП заметно отличается от 1 и ее можно приближенно заменить интегралом (14). В то же время найденные U_0 противоречат предположению о малости W_m ($W_m \leqslant T$), поскольку A имеет вид (14) и тогда, когда $W - T \leqslant U_0 \leqslant W$. Поправки, связанные с уточнением ν_0, не должны отразиться на порядке U_0, если ν_0 и ν_D одного порядка, поскольку $U_0 = U_0 |_{\nu_0 = \nu_D} (\nu_D/\nu_0)^{1/2}$. По-видимому, оценка $U_0 \sim \sim 0.1 \div 0.2$ эВ несколько занижена, поскольку теоретическое $L_0^{(\text{ДП})} \sim \sim (5 \div 7) \cdot 10^{-3}$ мкм меньше экспериментального $L_0^{(\text{П})} \geqslant 1$ мкм [18]. Сопоставление подвижностей длинных [4] и коротких [18] β-дислокаций при $T = 453$ К и $\sigma \approx 50$ МПа, согласно (17), (26), (33), (36), также дает более высокое U_0

$$U_0 = (\alpha \sigma b^2 a)^{1/2} + T \left\{ \ln \left(2^{1/2} v_{L \gg L_0} / b \right) - \ln \left(\partial v_{L \leqslant L_0} / \partial L \right) \right\} \approx 0.34 \text{ эВ}. \qquad (47)$$

Нельзя, однако, исключать, что расхождения в L_0 и U_0 вызваны замедлением эволюции докритических ДП в присутствии допороговых радиационных дефектов при электронной микроскопии коротких дислокаций в [18] либо влиянием на подвижность длинных дислокаций остаточной примеси, о чем может свидетельствовать ухудшение согласия теоретических и экспериментальных зависимостей $v(\sigma)$ при понижении T и σ (рис. 1).

Если, как было условлено, отбросить предположение об определяющем влиянии на найденные значения U_0 и W_m точечных дефектов, то большое значение W_m ($\approx W_{P2}$) физически означает, что натяжение дислокации не способно «поднять» ее (на участке перегиба) достаточно высоко над долинами поперечного рельефа Пайерлса. Малость U_0 означает при этом, что $W_{P2} \sim W_{P1}$. К сожалению, проверить этот вывод трудно, поскольку количественные оценки W_{P1}, кроме соответствующих одномерному рельефу [4], неизвестны.

В теории подвижности малость энергии перегиба имеет важные следствия. Значительно сужается область напряжений, где соотношения теории можно считать справедливыми $\sigma_* \leqslant \sigma \leqslant \sigma_{**}$. При $\sigma \geqslant \sigma_{**}$ необходимо учитывать, что $D = D(l)$ и $\tau = \tau(l_0)$, а при $\sigma \leqslant \sigma_*$, что $A = A(\sigma)$. Соответствующее усложнение теории не вызывает принципиальных затруднений, но при $\sigma \leqslant \sigma_*$ едва ли оправдано, поскольку при $\sigma \leqslant \underline{\sigma} \sim \sim \sigma_*$ соседние докритические ДП взаимно перекрываются и диффузионная модель [9, 21] теряет смысл. Действительно, при $\sigma = \underline{\sigma}$ по определению $\underline{\sigma}$ имеем

$$\langle l \rangle \equiv 2A \int_0^{l_c} l \exp\{-F(l)/T\}\, dl = b,$$

где $\langle l \rangle$ — средняя длина докритического ДП. Положив $A \approx A_0$, получим

$$\underline{\sigma} \approx (2T/\alpha)^{1/2} U_0 \exp(-U_0/T)/b^2 a.$$

В частности, у α-дислокаций при $T = 350 \div 500$ К $\sigma_* \approx 2 \div 7$ и $\underline{\sigma} \approx 1 \div 5$ МПа.

Полученным оценкам $U_0 \sim \bar{U}_0$ отвечают приблизительно одинаковые вклады ОП и ДП в подвижность дислокации. Если же $U_0 > \bar{U}_0$, о чем, возможно, свидетельствует оценка (47), то $A \approx b^{-1}$, а поскольку $q \sim (Ab)^{-1/2}$ при всех U_0 и умеренных σ, то соотношение между вкладами не должно существенно измениться. В пользу такого вывода свидетельствует, по-видимому, наблюдавшееся в [13] увеличение в 2 раза скорости 60-градусных сегментов дислокационных петель в Si в результате их «выхода» на поверхность.

Одним из следствий малости U_0 должен быть пересмотр подходов к интерпретации низкоэнергетических пиков внутреннего трения в полупроводниках (0.05 и 0.08 эВ в InSb [6]). Как правило, они отождествляются с барьерами Пайерлса второго рода, однако в свете полученных результатов можно предположить, что это пики Бордони. Попытка такой интерпретации уже предпринималась в работе [22] в отношении пика 0.16 эВ (Si). При этом, однако, использовались соотношения из работы [23], подвергшейся критике в [21].

Список литературы

[1] Мильвидский М. Г., Освенский В. Б. Структурные дефекты в монокристаллах полупроводников. М.: Металлургия, 1984. 256 с.
[2] Гийо П., Дорн Дж. // Актуальные вопросы теории дислокаций. М.: Мир, 1968. С. 270—310.
[3] Ерофеев В. Н., Никитенко В. И. // ЖЭТФ. 1971. Т. 60. № 5. С. 1780—1786.
[4] Ерофеева С. А., Осипьян Ю. А. // ФТТ. 1973. Т. 15. № 3. С. 772—776.
[5] Ohori K., Sumino K. // Phys. St. Sol. (a). 1972. V. 14. N 2. P. 489—499.
[6] Ohori K., Sumino K. // Phys. St. Sol. (a). 1974. V. 21. N 1. P. 217—225.
[7] Labush R. // Phys. St. Sol. 1965. V. 10. N 2. P. 645—657.
[8] Petukhov B. V., Polyakov Yu. I. // Bulgar. J. Phys. 1988. V. 15. N 5. P. 429—436.
[9] Казанцев А. П., Покровский В. Л. // ЖЭТФ. 1970. Т. 58. № 2. С. 677—682.
[10] Сузуки Т., Иши Т. // Физика прочности и пластичности. М.: Металлургия, 1972. С. 133—152.
[11] Brailsford A. D. // Phys. Rev. 1961. V. 122. N 3. P. 778—786.
[12] Никитенко В. И., Фарбер Б. Я., Иунин Ю. Л. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. № 4. С. 1304—1318.
[13] Louchet F. // Phil. Mag. A. 1981. V. 43. N 5. P. 1289—1297.
[14] Louchet F., Cochet Muchy D., Brechet Y. // Phil. Mag. A. 1988. V. 57. N 2. P. 327—335.
[15] Малыгин Г. А. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 9. С. 2757—2762.
[16] Никитенко В. И. Динамика дислокаций. Киев: Наукова думка, 1975. С. 7—26.
[17] Антипов С. А., Батаронов И. Л., Дрожжин А. И., Мишин И. В., Рощупкин А. М. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 9. С. 163—169.
[18] Fnaiech M., Reynaud F., Couret A., Caillard D. // Phil. Mag. A. 1987. V. 55. N 4. P. 405—423.
[19] Осипьян Ю. А., Ерофеева С. А. // ФТТ. 1969. Т. 11. № 4. С. 944—950.
[20] Вавилов В. С., Кив А. Е., Ниязова О. Р. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках. М.: Наука, 1981. 368 с.
[21] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
[22] Стародубцев С. В., Кайпназаров Д. К., Хизниченко Л. П., Кромер П. Ф. // ФТТ. 1966. Т. 8. № 6. С. 1924—1928.
[23] Seeger A., Donth H., Pfaff F. // Discuss. Faraday Soc. 1957. № 23. P. 19—30.

НПО «Орион»
Москва

Поступило в Редакцию
16 марта 1990 г.
В окончательной редакции
15 октября 1990 г.