

# Зарождение нанотрещин в поликристаллическом кремнии под действием зернограничного скольжения

© И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,  
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: ovidko@def.ipme.ru

(Поступила в Редакцию 30 августа 2006 г.

В окончательной редакции 4 октября 2006 г.)

Предложена теоретическая модель для описания зарождения наноскопических трещин (нанотрещин) в полукристаллическом кремнии. В рамках модели зарождение нанотрещин стимулируется зернограничным проскальзыванием, которое создает источники локальных напряжений в тройных стыках границ зерен. Релаксация таких локальных напряжений является основной движущей силой для зарождения нанотрещин вблизи тройных стыков границ зерен в поликристаллическом кремнии, в котором зернограничное проскальзывание вносит существенный вклад в пластическую деформацию в условиях циклического нагружения при комнатной температуре. В рамках модели проведен расчет критического внешнего напряжения для зарождения нанотрещин в поликристаллическом кремнии.

Работа выполнена при поддержке INTAS (грант N 03-51-3779), INTAS-AIRBUS (грант N 04-80-7339), гранта Президента РФ по поддержке ведущих научных школ НШ-4518.2006.1, программы РАН „Структурная механика материалов и элементов конструкций. Взаимодействие нано-, микро-, мезо- и макромасштабов при деформировании и разрушении“, Федерального агентства по науке и инновациям (грант Президента РФ МК-8340.2006.1) и Фонда поддержки отечественной науки.

PACS: 61.72.Mm, 62.20.Mk

## 1. Введение

Электронные и оптоэлектронные свойства кремния представляют собой предмет интенсивных экспериментальных и теоретических исследований в физике твердого тела (например, [1–10]). Во многих случаях кремниевые приборы эксплуатируются при постоянной или переменной механической нагрузке, что обуславливает особое внимание и к механическим свойствам кремния. При комнатной температуре кремний обычно демонстрирует хрупкое поведение, поскольку пластическая деформация путем обычного скольжения решеточных дислокаций в нем затруднена из-за высокого барьера Пайерлса [11–13]. Вместе с тем в последние годы было обнаружено явление динамической усталости поликристаллического кремния, т. е. его разрушения под действием циклического напряжения после достаточно большого числа циклов. Наличие динамической усталости свидетельствует о том, что разрушение поликристаллического кремния происходит в результате процессов накопления повреждений. Конкретные механизмы разрушения поликристаллического кремния могут быть связаны, в частности, с дислокационной активностью и зернограничным проскальзыванием [13]. Хотя дислокации наблюдались в поликристаллическом кремнии при его циклическом нагружении, исследования трещин в этом материале с помощью просвечивающей электронной микроскопии обычно не фиксировали дислокации в вершинах трещин (см. работу [13] и ссылки в ней). Таким образом, возможность образования и роста трещин в поликристаллическом кремнии при комнатной температуре в результате движения дислокаций неясна. Поэтому

в настоящей работе мы исследуем другой механизм разрушения поликристаллического кремния, связанный с зернограничным проскальзыванием. В рамках предлагаемой модели зернограничное проскальзывание, заторможенное в тройных стыках границ зерен, приводит к возникновению областей высоких напряжений вблизи тройных стыков. При достаточно больших значениях локальных напряжений в таких областях могут зарождаться стабильные нанотрещины, дальнейший рост и/или слияние которых могут приводить к полному разрушению материала. Похожий механизм зарождения трещин реализуется также в нанокристаллических металлах, в которых зернограничное скольжение вносит существенный вклад в пластическую деформацию [14–17]. В последующих разделах рассмотрим механизм образования нанотрещин в поликристаллическом кремнии (находящемся под действием постоянной растягивающей нагрузки) в результате зернограничного проскальзывания и оценим величину внешнего напряжения, необходимого для формирования таких нанотрещин.

## 2. Механизм образования нанотрещин в поликристаллическом кремнии. Основные положения

Для объяснения явления накопления повреждений в поликристаллическом кремнии, находящемся под действием механической нагрузки, будем использовать следующие предположения.

1) Будем предполагать, что поликристаллический кремний находится под действием постоянной одноос-

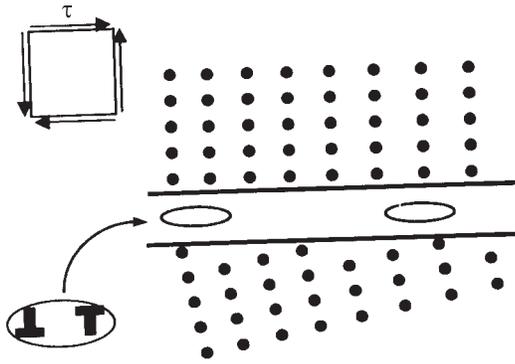


Рис. 1. Геометрия локальных сдвигов, осуществляющих проскальзывание вдоль границы зерен.

ной растягивающей нагрузки. Внешняя нагрузка создает сдвиговые напряжения в плоскостях границ зерен (ГЗ).

2) ГЗ, в которых действуют сдвиговые напряжения, являются областями пластического сдвига (проскальзывания). Будем считать, что сдвиг по ГЗ не требует притока дислокаций в ГЗ и их движения вдоль границ и происходит в результате термически активированных локальных сдвигов одномерных цепочек атомов [18] (рис. 1). В терминах теории дислокаций каждый локальный сдвиг эквивалентен образованию в ГЗ дислокационной петли скольжения. (В двумерной модели, когда предполагается, что ГЗ имеют бесконечную длину, такие дислокационные петли трансформируются в дислокационные диполи). Энергия активации каждого локального сдвига, а следовательно, и число таких сдвигов в единицу времени, зависят от локального сдвигового напряжения. В отсутствие сдвигового напряжения энергия активации локального сдвига вдоль ГЗ в заданном направлении равна энергии активации аналогичного сдвига в противоположном направлении. Поэтому при отсутствии сдвигового напряжения в ГЗ число локальных сдвигов вдоль ГЗ в обоих направлениях одинаково, и суммарный сдвиг равен нулю. Напротив, наличие сдвигового напряжения в ГЗ уменьшает энергию активации локальных сдвигов в одном направлении и увеличивает энергию активации сдвигов в противоположном направлении, приводя тем самым к возникновению ненулевого суммарного пластического сдвига.

3) Сдвиг по ГЗ тормозится в их тройных стыках. В результате вокруг тройных стыков ГЗ образуются области растяжения-сжатия, характеризующиеся высокой концентрацией напряжений.

4) При достаточно больших значениях напряжений в напряженных областях вблизи тройных стыков зарождаются нанотрещины. При не очень высоких значениях внешнего напряжения нанотрещины зарождаются в благоприятно ориентированных ГЗ. С увеличением внешнего напряжения такие нанотрещины растут и распространяются по всей длине ГЗ; одновременно число зернограничных нанотрещин растет. При еще больших значениях внешнего напряжения изолированные зерно-

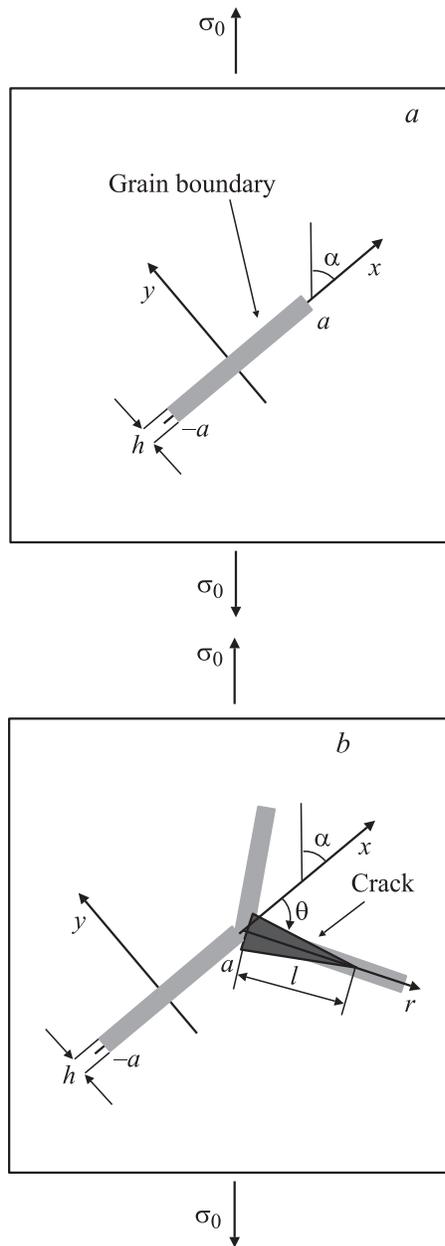
граничные нанотрещины сливаются, распространяются в соседние ГЗ или даже начинают распространяться во внутренние области зерен. В результате роста и слияния нанотрещин в поликристаллическом кремнии образуется макроскопическая раскалывающая трещина, приводящая к полному разрушению материала.

Основываясь на приведенных предположениях, в следующих разделах рассмотрим двумерные модели, описывающие заторможенный сдвиг по ГЗ и образование нанотрещин в поликристаллическом кремнии. В модели заторможенного сдвига по ГЗ предполагается, что кристалл содержит изолированную ГЗ бесконечной длины и конечной ширины и сдвиг вдоль ГЗ полностью тормозится на ее краях. С помощью этой модели рассчитаем напряжения, создаваемые в результате заторможенного сдвига. В модели образования нанотрещин рассмотрим более реалистичную ситуацию, в которой кристалл содержит двумерную сетку ГЗ, в одной из которых зарождается нанотрещина. При этом для расчета напряжений, инициирующих зарождение нанотрещины, воспользуемся результатами модели заторможенного сдвига в изолированной ГЗ конечной длины.

### 3. Модель заторможенного сдвига по границам зерен в поликристаллическом кремнии

Рассмотрим модельный кристаллический материал, пластически деформируемый под действием одноосной растягивающей нагрузки  $\sigma_0$ . В рамках модели этот кристаллический материал содержит изолированную ГЗ бесконечной ширины, конечной длины  $2a$  и толщины  $h$  (рис. 2, а). Материал считается упругоизотропным и имеет модуль сдвига  $G$  и коэффициент Пуассона  $\nu$ . Сама ГЗ рассматривается при этом как граница проскальзывания, скорость которого зависит от локального сдвигового напряжения, действующего в ГЗ. Пластический сдвиг, проходящий вдоль ГЗ, тормозится на ее краях, что приводит к возникновению вблизи краев ГЗ высоких напряжений.

Пусть ГЗ ориентирована под углом  $\alpha$  к направлению действия внешней нагрузки  $\sigma_0$  и в системе координат  $(x, y)$ , изображенной на рис. 2, а, занимает область  $(-a \leq x \leq a, -h/2 \leq y \leq h/2)$ . Для расчета зависимости скорости проскальзывания от сдвигового напряжения, действующего в ГЗ, воспользуемся концепцией локальных сдвигов [18]. В рамках этой концепции зернограничное проскальзывание осуществляется в результате термически активированных локальных сдвигов атомов ГЗ и связанных с ними одномерных полубесконечных цепочек атомов (рис. 1). В рассматриваемой нами двумерной модели каждый локальный сдвиг эквивалентен образованию в ГЗ диполя краевых дислокаций, расположенных на расстоянии, близком к межатомному. Образующиеся под действием сдвигового напряжения дислокационные диполи уменьшают это сдвиговое на-



**Рис. 2.** Геометрия модельной границы зерен (а) и нанотрещин (b) в деформируемом поликристаллическом кремнии.

пряжение и в конечном счете распределяются таким образом, чтобы полностью его снять.

Отметим, что локальные пластические сдвиги чувствительны к локальной нерегулярности атомной структуры ГЗ, а энергия активации локальных сдвигов представляет собой зернограничный аналог энергии Пайерлса, характеризующей сопротивление движению дислокаций в кристаллической решетке. При этом энергия активации локальных сдвигов определяет скорость зарождения новых сдвигов и таким образом влияет на скорость зернограничного проскальзывания.

Рассчитаем напряжение  $\sigma_{ij}$ , действующее в материале с границей проскальзывания (рис. 2, а). Будем искать

это напряжение в виде суммы внешнего напряжения  $\sigma_{ij}^e$ , создаваемого одноосной растягивающей нагрузкой  $\sigma_0$ , и дополнительного напряжения, связанного с проскальзыванием по ГЗ. Для расчета напряжения  $\sigma_{ij}$  пластическую деформацию материала, связанную с зернограничным проскальзыванием, будем моделировать непрерывным распределением зернограничных дислокаций с линейной плотностью  $\rho$  и векторами Бюргера  $s\mathbf{e}_x$  (что соответствует  $\rho > 0$ ) или  $-s\mathbf{e}_x$  (что соответствует  $\rho < 0$ ). С учетом этого представим напряжение  $\sigma_{ij}$  в виде

$$\sigma_{ij}(x, y) = \int_{-a}^a \rho(x') \sigma_{ij}^d(x - x', y) dx' + \sigma_{ij}^e, \quad (1)$$

где  $\sigma_{ij}^d(x - x', y)$  — напряжение, создаваемое дислокацией с вектором Бюргера  $s\mathbf{e}_x$ , расположенной в точке  $(x = x', y = 0)$ .

С помощью формулы (1) запишем выражение для сдвигового напряжения  $\tau = \sigma_{xy}$  ( $y = 0$ ), действующего в ГЗ. Учитывая соотношения [19]

$$\sigma_{xy}^d(x, y = 0) = \frac{Ds}{x}, \quad (2)$$

где  $D = G/[2\pi(1 - \nu)]$ , а также равенство  $\sigma_{xy}^e = (1/2)\sigma_0 \times \sin 2\alpha$ , из формулы (1) получаем

$$\tau = Ds \int_{-a}^a \frac{\rho(x')}{x - x'} dx' + \tau_0, \quad (3)$$

где  $\tau_0 = (1/2)\sigma_0 \sin 2\alpha$ .

Для расчета напряжения  $\sigma_{ij}$ , действующего в материале с границей проскальзывания, рассмотрим „установившийся режим“, реализующийся через некоторое время (строго говоря, бесконечное) после начала проскальзывания по ГЗ. Произшедшее к началу действия установившегося режима зернограничное проскальзывание полностью снимает сдвиговое напряжение в ГЗ, в результате чего проскальзывание по ГЗ прекращается. В установившемся режиме имеем  $\tau = 0$ . Тогда из (3) получаем следующее уравнение для плотности дислокаций  $\rho(x)$ :

$$\int_{-a}^a \frac{\rho(x')}{x - x'} dx' = -\frac{\tau_0}{Ds}. \quad (4)$$

Решение этого уравнения может быть получено из общей формулы [20] и имеет вид

$$\rho(x) = \frac{\tau_0 x}{\pi Ds \sqrt{a^2 - x^2}}. \quad (5)$$

Теперь подстановка формулы (5) и выражений [19] для напряжений  $\sigma_{ij}^d$ , создаваемых краевой дислокацией в бесконечном теле, в формулу (1) позволяет получить выражения для напряжений  $\sigma_{ij}$ , создаваемых внешним напряжением и заторможенным сдвигом. Эти выражения будут использованы в следующем разделе для расчета условий зарождения и роста нанотрещин в деформируемом поликристаллическом кремнии.

#### 4. Зарождение и рост зернограничных нанотрещин в поликристаллическом кремнии

Рассмотрим теперь поликристаллический кремний, находящийся под действием одноосной растягивающей нагрузки  $\sigma_0$ . В рамках рассматриваемой двумерной модели будем полагать, что материал содержит двумерную сетку ГЗ. Рассмотрим тройной стык ГЗ и примыкающие к нему три ГЗ. Для оценки условий зарождения и роста зернограничных нанотрещин в первом приближении будем считать, что пластический сдвиг происходит лишь в одной из этих трех ГЗ, а пластическим сдвигом в соседних ГЗ можно пренебречь. В этом случае напряжения, создаваемые пластическим сдвигом вдоль одной из ГЗ, рассчитываются по формулам раздела 2. При достаточно высоком внешнем напряжении и благоприятной ориентации этой ГЗ зернограничное проскальзывание, заторможенное в тройном стыке, может инициировать зарождение нанотрещины в этом тройном стыке и ее распространение вдоль одной из соседних ГЗ, примыкающих к этому тройному стыку.

Пусть нанотрещина имеет длину  $l$  и распространяется вдоль ГЗ, образующей угол  $\theta$  с исходной ГЗ (рис. 2, *b*). Для расчета условий роста такой нанотрещины введем полярную систему координат  $(r, \theta)$ , как показано на рис. 2, *b*, и в первом приближении воспользуемся силовым критерием [21]

$$K_I > K_{IC}, \quad (6)$$

где  $K_I$  — коэффициент интенсивности напряжений для трещины нормального отрыва [21],

$$K_I = \sqrt{\frac{2}{\pi l}} \int_0^l \sigma_{\theta\theta}(r, \theta) \sqrt{\frac{r}{l-r}} dr, \quad (7)$$

а  $K_{IC}$  — критическое значение [21] коэффициента интенсивности напряжений  $K_I$  для хрупкого тела,

$$K_{IC} = \sqrt{\frac{4\gamma_e G}{1-\nu}}, \quad (8)$$

где  $\gamma_e = \gamma - \gamma_b/2$ ,  $\gamma$  — удельная поверхностная энергия, а  $\gamma_b$  — удельная энергия ГЗ.

Рассмотрим сначала наиболее простой случай, когда длина нанотрещины  $l$  мала по сравнению с длиной  $2a$  ГЗ, по которой происходит проскальзывание. В этом случае можно воспользоваться асимптотическими выражениями для напряжений  $\sigma_{\theta\theta}$ , действующих вблизи тройного стыка, где зарождается нанотрещина.

При расчете асимптотических выражений для напряжений  $\sigma_{\theta\theta}$  заметим, что напряжения, создаваемые виртуальными дислокациями, распределенными по границе проскальзывания, равны напряжениям, создаваемым плоской сдвиговой трещиной длины  $2a$ , образовавшейся

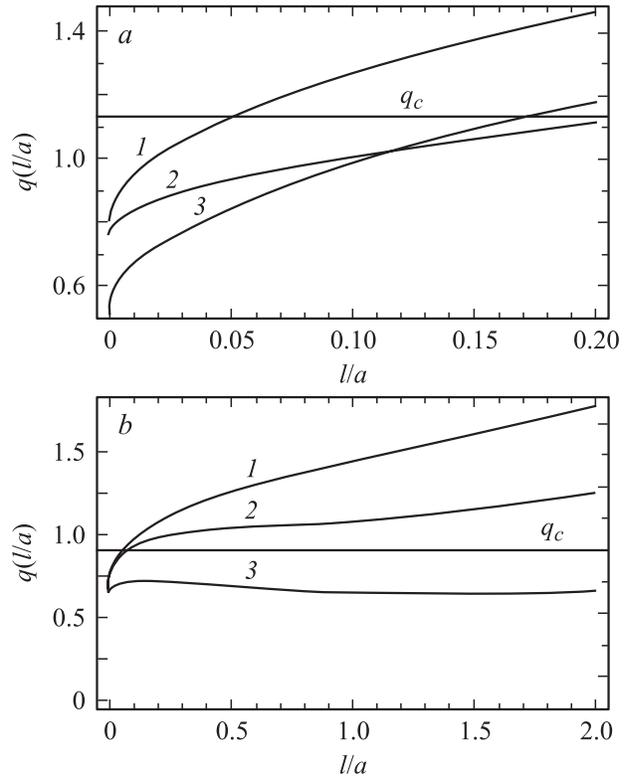


Рис. 3. Зависимости параметра  $q$  от безразмерной длины  $l/a$  зернограничной нанотрещины для различных значений параметров. *a*)  $\alpha = \pi/4$  и  $\theta = \pi/3$  (1),  $\pi/2$  (2) и  $\pi/6$  (3); *b*)  $\theta = \pi/2$  и  $\alpha = \pi/6$  (1),  $\pi/4$  (2) и  $\pi/3$  (3).

в поле постоянного сдвигового напряжения  $\tau_0$ . Используя асимптотические выражения [21] для напряжений, создаваемых плоской сдвиговой трещиной вблизи одного из ее краев, и складывая их с полем внешнего напряжения  $\sigma_{ij}^e$ , получаем следующее асимптотическое выражение для напряжений  $\sigma_{\theta\theta}(r, \theta)$ , создаваемых внешним напряжением и зернограничным проскальзыванием:

$$\sigma_{\theta\theta}(r \ll 2a, \theta) \approx \left( \frac{3}{2} \sqrt{\frac{a}{2r}} \sin 2\alpha \sin \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2(\alpha + \theta) \right) \sigma_0. \quad (9)$$

Теперь подстановка формул (7)–(9) в критерий (6) дает следующее условие роста нанотрещины:  $q(l/a) > q_c$ , где

$$q(l/a) = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{l}{2}} \sin^2(\alpha + \theta) + \frac{3\sqrt{2}}{2} \sin 2\alpha \sin \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}, \quad (10)$$

$$q_c = \sqrt{\frac{2\pi\gamma_e G}{(2-\nu)a\sigma_0^2}}. \quad (11)$$

Зависимости  $q(l/a)$  приведены на рис. 3, *a* для случая  $\alpha = \pi/4$  и различных значений угла  $\theta$ . Атермический рост нанотрещины при наличии зернограничного проскальзывания возможен, когда кривые  $q(l/a)$  лежат выше горизонтальной прямой, показывающей значение параметра  $q_c$ . Из рис. 3, *a* следует, что при достаточно высоком внешнем напряжении (и соответственно при достаточно малом значении параметра  $q_c$ ) рост зернограничной нанотрещины при наличии зернограничного проскальзывания становится возможным при любой ее длине (по крайней мере, пока выполняется условие  $l \ll 2a$ ). В этом случае зарождение нанотрещины не требует термических флуктуаций. Для случая поликристаллического кремния с характерными значениями параметров  $G = 51$  ГПа,  $\nu = 0.27$ ,  $a = 100$  нм и  $\gamma_e \approx 1$  Дж/м<sup>2</sup> будем предполагать, что атермическое зарождение нанотрещины возможно, если  $q(l/a) > q_c$  при  $l/a > 0.05$ . Это предположение основано на оценке, согласно которой на расстояниях от тройного стыка, меньших  $0.05a$  ( $= 5$  нм), растягивающие напряжения превышают или сравнимы с теоретическим пределом прочности. Тогда в наиболее благоприятном для роста нанотрещины случае, когда  $\alpha \approx \pi/4$  и  $\theta \approx \pi/3$ , получаем, что атермическое зарождение нанотрещины в ГЗ возможно при  $q_c < 1.1$ . (Значение  $q_c = 1.1$  соответствует случаю, когда соотношение  $q(l/a) > q_c$  выполняется при  $l/a = 0.05$ ). Подставляя в последнее неравенство выражение (11) для  $q_c$  и значения параметров, характерные для поликристаллического кремния, получаем, что в этом случае атермическое образование нанотрещины возможно при внешних напряжениях  $\sigma_0 > 1.9$  ГПа.

Отметим, что использование асимптотических выражений для напряжений, создаваемых зернограничным проскальзыванием, дает возможность определить условия для атермического зарождения зернограничных нанотрещин, но не позволяет выяснить, будут ли они расти дальше. Для исследования условия роста нанотрещин с помощью формул (1) и (5) мы получили точные выражения для напряжений  $\sigma_{\theta\theta}(r, \theta)$  для случая  $\theta = \pi/2$  и рассчитали значение параметра  $q$  для нанотрещины произвольной длины, растущей из тройного стыка перпендикулярно границе проскальзывания. Зависимости  $q(l/a)$  для случая  $\theta = \pi/2$  и различных значений угла  $\alpha$  приведены на рис. 3, *b*, из которого следует, что при благоприятной ориентации ГЗ, когда происходит пластический сдвиг (кривые 1 и 2), атермически зародившаяся нанотрещина будет расти дальше. Это означает, что при значениях внешнего напряжения  $\sigma_0 > 1.9$  ГПа в поликристаллическом кремнии может происходить не только атермическое зарождение нанотрещин, но и их последующий рост по всей длине ГЗ. Значение напряжения, равное 1.9 ГПа, меньше экспериментальных значений предела прочности поликристаллического кремния при циклическом нагружении [11,13]. Следовательно, заторможенный сдвиг по ГЗ может служить реальной причиной образования зернограничных нанотрещин в поликристаллическом кремнии.

## 5. Заключение

Таким образом, зернограничное проскальзывание, заторможенное в тройных стыках границ зерен в поликристаллическом кремнии, может эффективно стимулировать зарождение зернограничных нанотрещин. Заторможенное зернограничное проскальзывание создает источники внутренних напряжений дислокационного типа. Релаксация таких напряжений стимулирует зарождение нанотрещин вблизи тройных стыков. При достаточно высоких значениях внешнего напряжения рост и/или слияние образовавшихся зернограничных нанотрещин в поликристаллическом кремнии может привести к образованию макроскопической раскалывающей трещины и полному разрушению материала.

## Список литературы

- [1] В.Н. Брудный, С.Н. Гриняев, А.В. Двуреченский. ФТТ **47**, 1941 (2005).
- [2] С.Ю. Давыдов. ФТТ **47**, 1711 (2005).
- [3] И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев. ФТТ **47**, 300 (2005).
- [4] Э.А. Штейнман. ФТТ **47**, 9 (2005).
- [5] Д.И. Тетельбаум, О.Н. Горшков, А.П. Касаткин, А.Н. Михайлов, А.И. Белов, Д.М. Гапонова, С.В. Морозов. ФТТ **47**, 17 (2005).
- [6] О.А. Шегай, А.Ю. Березовский, А.И. Никифоров, В.В. Ульянов. ФТТ **47**, 33 (2005).
- [7] Т.С. Шамирзаев, М.С. Сексенбаев, К.С. Журавлев, А.И. Никифоров, В.В. Ульянов, О.П. Пчеляков. ФТТ **47**, 80 (2005).
- [8] Р.И. Баталов, П.М. Баязитов, Н.М. Хуснуллин, Е.И. Теруков, В.Х. Кудоярова, Г.Н. Мосина, Б.А. Андреев, Д.И. Крыжков. ФТТ **47**, 5 (2005).
- [9] L. Vines, E. Monakhov, B.G. Svensson, J. Jensen, A. Hallen, A.Yu. Kuznetsov. Phys. Rev. B **73**, 085 312 (2006).
- [10] K.S. Nakayama, M.M.G. Alemany, T. Sugano, K. Ohmori, H. Kwak, J.R. Chelikowsky, J.H. Weaver. Phys. Rev. B **73**, 035 330 (2006).
- [11] C.L. Muhlstein, E.A. Stach, R.O. Ritchie. Acta Mater. **50**, 3579 (2002).
- [12] H. Kahn, R. Ballarini, A.H. Heuer. Current Opinion Solid State Mater. Sci. **8**, 71 (2004).
- [13] H. Kahn, L. Chen, R. Ballarini, A.H. Heuer. Acta Mater. **54**, 667 (2006).
- [14] K.S. Kumar, S. Suresh, M.F. Chisholm, J.A. Horton, P. Wang. Acta Mater. **51**, 387 (2003).
- [15] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Acta Mater. **52**, 1201 (2004).
- [16] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Acta Mater. **53**, 1347 (2005).
- [17] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Phil. Mag. **86**, 1415; 3487 (2006).
- [18] H. Conrad, J. Narayan. Scripta Mater. **42**, 1025 (2000).
- [19] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1974). 600 с.
- [20] А.Д. Полянин, А.В. Манжиров. Справочник по интегральным уравнениям. Факториал, М. (1998). С. 203.
- [21] Механика разрушения и прочность материалов / Под ред. В.В. Панасюка. Наук. думка, Киев (1988). Т. 1. 488 с.