

05.1

## Связь показателя пластичности с псевдопотенциалом ковалентных тетраэдрических кристаллов

© А.Ф. Щуров, В.А. Перевошиков, А.В. Круглов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Поступило в Редакцию 29 октября 1997 г.

На основе экспериментальных результатов по измерению показателя пластичности ковалентных кристаллов — Si, Ge, соединений типа  $A^{III}B^V$  — установлена связь характеристик низкотемпературной пластичности тетраэдрических кристаллов с псевдопотенциалом.

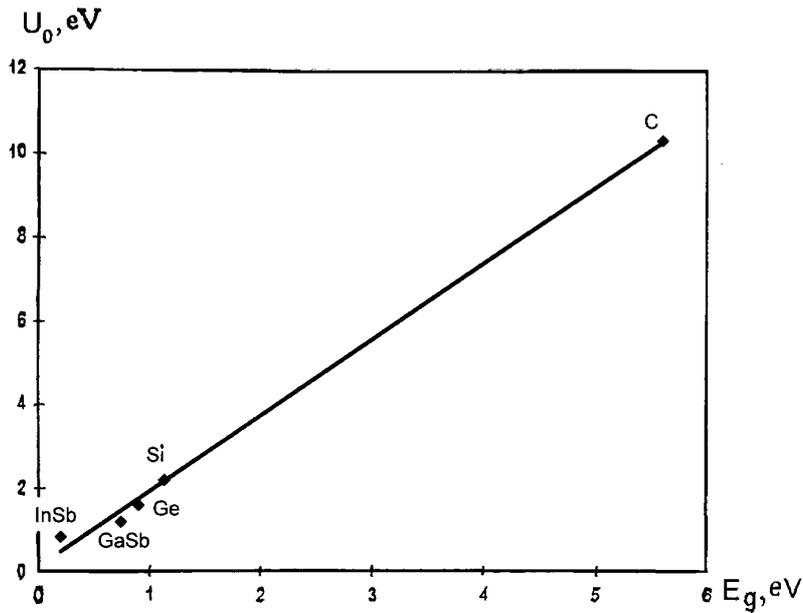
К настоящему времени в литературе накопилось много теоретических и экспериментальных результатов, указывающих на связь пластических свойств ковалентных кристаллов с их электронным строением, например [1–7]. Так, в работах [4–5] приводятся зависимости характеристик пластичности (энергия активации и скорость движения дислокаций, критическое сдвиговое напряжение, твердость и др.) от ширины запрещенной зоны кристалла (рис. 1). Известно [6], что скорость движения дислокаций может быть представлена в виде

$$V_d = B\tau^m \exp(-U_0/kT), \quad (1)$$

где  $B$  и  $m$  — некоторые постоянные,  $\tau$  — приложенное напряжение. Из (1) видно, что с увеличением  $U_0$  скорость дислокации уменьшается. Таким образом, как следует из рис. 1, с увеличением ширины запрещенной зоны  $E_g$  пластичность ковалентных кристаллов уменьшается. В работах [4,7] корреляция  $U_0$  с  $E_g$  объясняется необходимостью в процессе движения дислокаций разрыва ковалентных связей и переводом электронов из валентной зоны в зону проводимости.

В данной работе предпринята попытка показать связь характеристик низкотемпературной пластичности ковалентных тетраэдрических кристаллов с псевдопотенциалом.

В качестве характеристики пластичности был выбран безразмерный параметр  $\delta_H$ , называемый показателем пластичности. Он определяет



**Рис. 1.** Корреляция энергии активации движения дислокаций с шириной запрещенной зоны для ковалентных кристаллов [4].

долю пластической деформации в общей упругопластической деформации, происходящей под индентором, при отсутствии макроскопического разрушения материала и может быть определен по формуле [8]:

$$\delta_H = 1 - 14.3(1 - \nu - 2\nu^2)HV/E, \quad (2)$$

где  $HV$  — твердость по Виккерсу,  $E$  — модуль Юнга,  $\nu$  — коэффициент Пуассона. Измерения проводились на приборе ПМТ-3.

В качестве объектов исследований были выбраны элементарные полупроводники — кремний и германий и полупроводниковые соединения типа  $A^{III}B^V$  — фосфиды, арсениды и антимониды индия и галлия. Все образцы представляли собой прямоугольные пластины размером не менее  $10 \times 10$  mm, толщиной не менее 1 mm, с кристаллографической ориентацией основной поверхности по (111) для Si и Ge и по (111) В

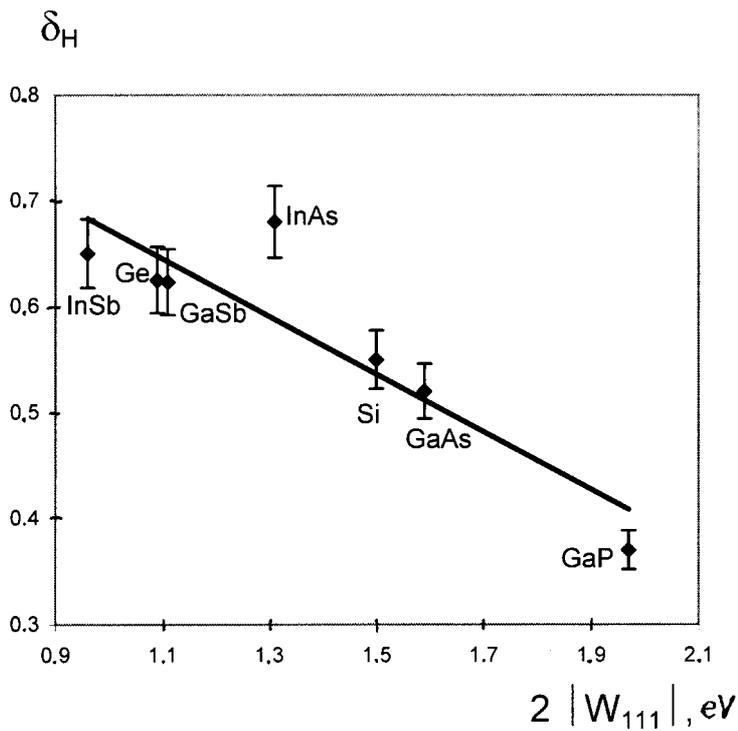
для соединений  $A^{III}B^V$ . Предварительно поверхность всех образцов была обработана и подготовлена по следующей схеме: двусторонняя обработка (с рабочей и нерабочей стороны) механическим шлифованием и алмазным полированием, затем образцы подвергались химико-динамическому полированию [9] для удаления структурно-нарушенного слоя монокристаллов и получения поверхности с высотой неровностей  $\leq 0.05 \mu\text{m}$ .

Метод микроиндентирования позволяет получить характеристики низкотемпературной пластической деформации, которая осуществляется главным образом за счет скольжения дислокаций, без наложения высокотемпературных процессов деформации. К настоящему времени почти все имеющиеся в литературе данные относятся к области относительно высоких температур, низкотемпературные закономерности остаются малоизученными из-за хрупкого разрушения материалов. Для низкотемпературной пластичности одним из авторов данной работы была высказана гипотеза о связи энергии активации движения дислокаций  $U_0$  (барьер Пайерлса при  $\sigma = 0$ ) с псевдопотенциалом [10]. В этой работе показано, что при консервативном движении дислокации сквозь решетку кристалла энергия перестройки атомов в ядре дислокации без изменения средней плотности пропорциональна эффективному сферическому потенциалу  $V_{eff}(r)$ , который пропорционален квадрату псевдопотенциала  $W(q)$  [11]. Отсюда и следует связь энергии активации  $U_0$  с шириной запрещенной зоны  $E_g$ , поскольку  $E_g = 2|W(q)|$  [12].

В данной работе устанавливается связь другой характеристики пластичности (показателя пластичности  $\delta_H$ ) с псевдопотенциалом.

Для описания электронных состояний в соединениях  $A^{III}B^V$  и в кристаллах группы углерода удобно использовать большую зону Джонса, объем которой достаточен, чтобы разместить все четыре электрона на один атом. Плоскостями, ограничивающими зону Джонса, являются плоскости (220), дифракция на которых мала. Однако дифракционные процессы могут приводить к переходам электронов через всю зону Джонса с изменением волнового вектора электрона на  $[111] 2\pi/a$  [11]. Этому соответствует больший матричный элемент  $W_{111}$ , который и определяет ширину запрещенной зоны в точке X. Таким образом, величина щели на грани (220) равна  $2|W_{111}|$ , а сам матричный элемент равен [13]:

$$W_{111} = -4\pi Ze^2/V_0 q^2 \varepsilon(0), \quad (3)$$



**Рис. 2.** Зависимость показателя пластичности от псевдопотенциала ковалентных кристаллов.

где  $q = \sqrt{3} \cdot 2\pi/a$ ,  $Z$  — число валентных электронов в расчете на один атом,  $V_0$  — атомный объем,  $\varepsilon(0)$  — статическая диэлектрическая проницаемость.

Используя известные экспериментальные значения  $\varepsilon(0)$  [11], нами были вычислены величины  $2|W_{111}|$  и построен график зависимости показателя пластичности  $\delta_H$  от теоретического значения ширины запрещенной зоны, вычисленной с помощью метода псевдопотенциала  $2|W_{111}|$  (рис. 2). Получена вполне четкая зависимость, свидетельствующая о применимости псевдопотенциальной теории к описанию пластических свойств ковалентных кристаллов.

Величина  $W_{111}$  может быть легко вычислена по данным о кристаллической и электронной структуре вещества, что дает возможность теоретического предсказания его пластических свойств.

## Список литературы

- [1] Хаазен П. // Атомистика разрушения (Из сер. Новое в зарубежной науке. Механика). М.: Мир, 1987. С. 213–235.
- [2] Осипьян Ю.А., Петренко В.Ф. // Физика соединений  $A^{II}B^{VI}$  / Под ред. А.Н. Георгобиани, М.К. Шейнкмана. М.: Наука, 1986. С. 35–71.
- [3] Teichler H. // Phys. Stat. Sol. 1967. V. 23. P. 341–351.
- [4] Gilman J. // J. of Appl. Physics. 1975. V. 46. N 12. P. 5110–5113.
- [5] Белоусова Ю.Е., Литвинов Ю.М., Хашимов Ф.Р. // Электронная техника. Сер. 6. Материалы. 1984. В. 1. С. 28–31.
- [6] Судзуки Т., Есиага Х., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность. М.: Мир, 1989. 294 с.
- [7] Ahlquist C., Carroll M., Stroempl P. // J. Phys. Chem. Solids. 1972. V. 33. P. 337–342.
- [8] Milman Yu., Galanov B., Chtugunova S. // Acta. Met. 1993. Mater. V. 41. N 109. Overview. N 147. P. 2523–2532.
- [9] Перевощиков В.А., Скупов В.Д. Особенности абразивной и химической обработки поверхности полупроводников. Н. Новгород: изд. ННГУ, 1992. 200 с. (монография).
- [10] Щуров А.Ф. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. В. 20. С. 72–77.
- [11] Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. Т. 2. М.: Мир, 1983. 335 с.
- [12] Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М.: Мир, 1973. 560 с.
- [13] Маделунг О. Физика твердого тела. Локализованные состояния. М.: Наука, 1985. 120 с.