

О мезоскопической дисперсии длин пробегов дислокаций в полупроводниковых кристаллах

© Б.В. Петухов[¶]

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Российской академии наук,
119333 Москва, Россия

(Получена 4 марта 2010 г. Принята к печати 15 марта 2010 г.)

Показано, что экспериментально обнаруженная большая величина дисперсии длин пробегов дислокаций и затягивание ее выхода на стационарное значение в полупроводниковых материалах может объясняться стохастичностью процесса рождения дислокационных перегибов (кинков). Эта стохастичность приводит к развитию шероховатости линии дислокации, описываемой скейлинговыми соотношениями, включающими в себя мезоскопические временные и пространственные масштабы.

1. Введение

Дислокации, будучи протяженными дефектами кристаллической решетки, оказывают существенное влияние на электрофизические и механические свойства полупроводников. Понимание закономерностей их динамики важно как для выращивания полупроводниковых кристаллов, так и для обеспечения стабильной работы изделий микроэлектроники. Совершенствование технологии производства полупроводниковых материалов открыло широкие возможности экспериментального изучения динамики отдельных дислокаций, доступных наблюдениям не на микроскопическом, а на мезоскопическом уровне. Движение дислокаций в достаточно чистых материалах контролируется собственным потенциальным рельефом кристаллической решетки и происходит путем термоактивируемого рождения пар перегибов (иначе, кинков) и последующего их разбега вдоль линии дислокации [1]. Имеется большое количество исследований подвижности дислокаций в различных материалах, выполненных как методом избирательного химического травления поверхности, так и просвечивающими методами, включая наблюдения движения дислокаций *in situ* [1,2].

Значительно более сложной является проблема изучения динамики самих кинков, так как их непосредственное наблюдение требует перехода на микроскопический уровень. Такие исследования до настоящего времени уникальны [3]. Поэтому для расшифровки кинкового механизма представляют интерес дополнительные возможности косвенного изучения элементарных актов движения дислокаций, предоставляемые наблюдениями на мезоскопическом уровне, для которого существуют хорошо разработанные методики. В большинстве экспериментальных работ ограничиваются измерениями скорости перемещения дислокации как целого, тем самым отсекая значительный пласт доступной изучению информации. Теоретическое описание таких принципиально доступных изучению характеристик динамики дислокаций является целью настоящей работы.

В простейшем виде кинковая модель движения дислокации под нагрузкой выглядит следующим образом. Отдельно взятый кинк представляет собой ступеньку с высотой, равной расстоянию между долинами периодического кристаллического рельефа h . С частотой J в единицу времени на единице длины дислокации в случайных местах под действием тепловых флуктуаций рождаются пары кинк-антикинк. Затем кинк и антикинк движутся в разные стороны со скоростями $\pm v_k$. Первоначальный размер пары, так же как и ширины кинков, считается пренебрежимо малым. Взаимодействием кинков за пределами критического размера рождения пары также пренебрегается, исключая аннигиляцию при столкновении.

При изучении кинкового механизма, как правило, ограничиваются обсуждением двух режимов. Один свойствен коротким дислокационным сегментам, время смещения которых на период решетки h определяется зарождением одной пары кинков, а временем распространения кинка и антикинка до концов сегмента $\sim L/v_k$ можно пренебречь по сравнению со средним временем рождения пары $1/JL$ (L — длина сегмента). Таким образом, средняя скорость V_d короткой дислокации пропорциональна ее длине: $V_d = hJL$. Второй режим свойствен длинным сегментам, на которых за время разбега одной пары кинков успевает происходить множественное рождение других пар. Кинки и антикинки из параллельно и независимо рожденных пар движутся навстречу друг другу и при столкновении аннигилируют, переводя тем самым дислокационный сегмент в следующую долину кристаллического рельефа. Граница раздела режимов L_0 определяется из условия динамического баланса, как та длина, на которой среднее время зарождения кинка $t = 2/JL_0$ сравнивается со средним временем пробега кинка до его аннигиляции с антикинком из соседней пары L_0/v_k , так что $L_0(2v_k/J)^{1/2}$ (численный множитель 2 фигурирует здесь для удобства использования в последующих формулах). При $L \approx L_0$ зависимость скорости дислокации от ее длины насыщается на уровне $V_d \approx hJL_0 = h(2v_kJ)^{1/2}$ и при $L > L_0$ зависимость скорости от длины отсутствует.

По своей сути данная модель является достаточно общей и подходит для описания кинетики переключения

[¶] E-mail: petukhov@ns.crys.ras.ru

состояний любых линейных систем. В частности, точно такой же моделью описывается движение ступеней на поверхности растущего кристалла, где роль кинков играют изломы формы ступеней [4]. В дальнейшем будут даваться ссылки на работы по данной модели без различения ее конкретного воплощения.

При насыщении зависимости от длины время жизни кинка $t_0 = (2/v_k J)^{1/2}$ на длинной дислокации является единственной величиной с размерностью времени, которую можно составить из параметров J и v_k . Естественно было бы предположить, что это время полностью характеризует кинетику смещения дислокации. Однако наблюдаемый в экспериментах на Ge [5] рост дисперсии длин пробегов дислокаций, продолжающийся на временах $t \gg t_0$, вынуждает предположить наличие другого времени релаксации, значительно превышающего t_0 . Возможное разрешение этого парадокса предлагается далее.

Поскольку дислокация представляет собой протяженный объект, обладающий большим числом флуктуирующих степеней свободы, ее движение является сложным процессом неравновесной статистической физики. Подобным процессам с участием вихрей в сверхпроводниках, ступеней на кристаллических поверхностях, полимеров, межфазных или доменных границ в пространствах различной размерности посвящены многочисленные работы, как теоретические, так и экспериментальные (см. обзоры [6,7] и цитируемую в них литературу). При статистическом описании одномерных систем наряду с численными расчетами нередко возможно применение аналитических методов, в связи с чем для них в последнее время благодаря усилиям сообщества математиков и физиков достигнут значительный прогресс (см., например, [8–11]). Этот прогресс позволяет значительно усовершенствовать теорию кинкового механизма и ее сопоставление с экспериментальными данными.

2. Статистическое описание формы движущейся дислокации

Стохастичность процесса рождения пар кинков приводит к тому, что различные участки дислокации движутся с различными скоростями, так что профиль дислокации со временем приобретает случайно изрезанный вид. Аннигиляция кинков, напротив, приводит к выравниванию профиля. Конкуренция этих двух процессов составляет главное содержание явления, и в литературе встречаются противоречивые мнения на преобладание того или иного фактора: будет ли ширина профиля конечной или же она будет неограниченно возрастать с увеличением длины дислокации. В пользу первой точки зрения говорят результаты изучения подходов, опирающиеся на полученное Колмогоровым точное решение задачи об однослойном покрытии пространства растущими зародышами новой фазы [12] (см. также [13]). Обобщения на многослойные покрытия с использованием рекуррентных соотношений, связывающих покрытия после-

довательных слоев, приводят к выводу, что детерминированное движение и аннигиляция кинков обуславливают конечную ширину и относительную гладкость профиля границы новой фазы, в рассматриваемом случае — профиля смещений дислокации [14–17].

Другая точка зрения заключается в предположении о превалировании стохастической составляющей процесса, позволяющей рассматривать кинки и антикинки как „газ“ квазичастиц [18,19], в котором флуктуации растут с увеличением размера системы. Эти два подхода приводят к близким, хотя и несколько отличающимся значениям для скорости V_d движения линии в целом: $V_d = (e/\sqrt{2})(Jv_k)^{1/2}$ в первом случае и $V_d = \sqrt{2}(Jv_k)^{1/2}$ во втором случае ($e = 2.718\dots$ — число Эйлера). Более существенным качественным отличием второго подхода является то, что он приводит к заключению о растущей с увеличением размера ширине и шероховатости профиля стационарно движущейся дислокации. Следовательно, время релаксации к стационарному режиму в этом случае также зависит от полной длины дислокации L .

Для описания подобной ситуации в теории роста кристаллов разработана весьма продвинутая идеология, а наличие взаимно однозначного соответствия кинкового механизма движения дислокаций с одномерным вариантом роста кристаллов позволяет воспользоваться полученными там нетривиальными результатами. Упомянем те из них, которые могут быть полезны для экспериментального изучения динамики дислокаций.

В первую очередь это скейлинговое описание среднеквадратичной ширины $w = ((l - \bar{l})^2)^{1/2}$ профиля движущейся дислокации ($\bar{l} = V_d t$ — среднее смещение). Количественно оно выражается в том, что при временах, превышающих некоторое микроскопическое значение (в нашем случае это t_0), т.е. в мезоскопическом масштабе, w описывается следующим соотношением между обезразмеренными величинами $w' = w/h$, $L' = L/L_0$, $t' = t/t_0$:

$$w' = L'^{\alpha} f(t'/L'^z). \quad (1)$$

Для показателей степени получены значения $\alpha = 1/2$, $z = 3/2$ [7,20]. Функция $f(x)$ обладает следующими общими свойствами. При малых значениях аргумента $f(x) \approx x^{\beta}$, так что при временах $t' \ll L'^z$, т.е. в нестационарном режиме, ширина профиля растет со временем степенным образом $w' \propto t'^{\beta}$, где $\beta = \alpha/z = 1/3$. При больших значениях аргумента, т.е. в режиме насыщения, $f(x) \approx \text{const}$, так что при $t' \gg L'^z$ ширина профиля выходит на стационарное значение $w' \approx L'^{1/2}$. Показатель $1/2$ в последнем соотношении свидетельствует о том, что профиль стационарно движущейся дислокации подобен профилю временной зависимости смещения при случайном блуждании одномерной частицы, так что флуктуации описываются обычным нормальным законом. Однако в нестационарном режиме, описанном далее, это не так.

Скейлинговое соотношение (1) и теоретически предсказанные значения показателей α и z неоднократно

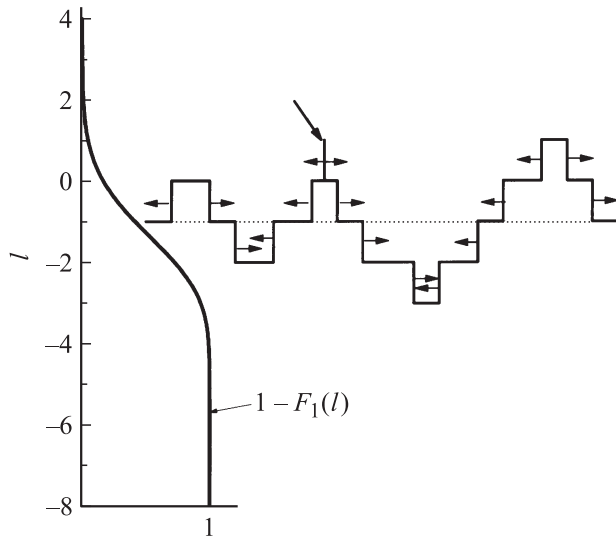


Рис. 1. Профиль смещения дислокации (слева) и фрагмент случайной реализации ее формы в произвольном масштабе (справа). Большая стрелка указывает место рождения новой пары кинков, маленькие стрелки показывают направления движения кинков.

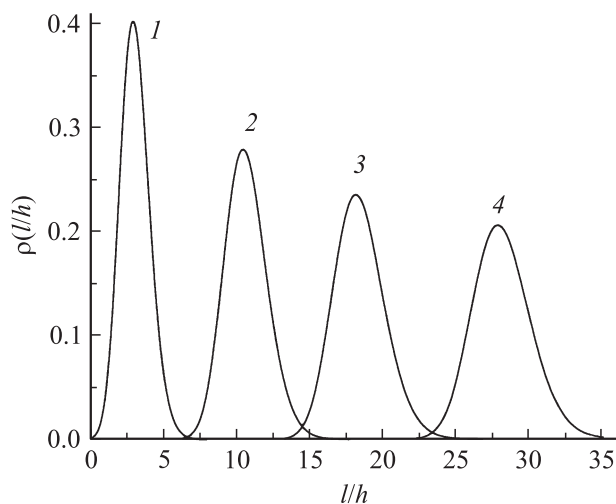


Рис. 2. Эволюция со временем распределения ансамбля дислокаций по длинам пробега. Кривые 1–4 отвечают моментам времени $t/t_0 = 2, 6, 10, 15$ соответственно.

подтверждались численным моделированием, в том числе и применительно к дислокациям [21], и их принадлежность к так называемому классу универсальности Кардара–Паризи–Занга достаточно убедительно установлена. Сравнительно недавно произошел очередной крупный прорыв в теоретическом изучении модели. Было обнаружено соответствие между рассматриваемой моделью и свойствами определенных ансамблей хаотических матриц [8–10]. Это позволило применить известные распределения собственных значений хаотических матриц для описания статистических свойств профиля одномерных растущих поверхностей, что, как

уже отмечалось, может быть перенесено также и на динамику дислокаций. Благодаря этому удастся более полно проанализировать статистические характеристики формы дислокации для различных геометрий и начальных условий. Например, для старта из плоского состояния $l(x, t = 0) = 0$ рассчитана эволюция со временем не только среднеквадратичной ширины w , но и полной вероятности флуктуаций смещения в какой-либо точке (ввиду статистической однородности можно взять в этом качестве $x = 0$), выражающей формулой

$$P[l(0, t) - V_d t / h \leq s(t/t_0)^{1/3}] = F_1(s2^{2/3}). \quad (2)$$

Здесь $V_d = h(2Jv_k)^{1/2}$, P обозначает вероятность выполнения условия, описываемого аргументом в квадратных скобках, $F_1(x)$ — распределение Трэйси–Уидома для гауссовского ортогонального ансамбля хаотических матриц. Функции $F_1(x)$, $F_1' = dF_1(x)/dx$ протабулированы в [22] и проиллюстрированы на рис. 1, 2.

Плотность распределения длин пробегов, позволяющая описывать экспериментальные гистограммы длин пробегов дислокаций, получается дифференцированием уравнения (2):

$$\rho(l(t)/h) = h \frac{dP}{dl} = \frac{2^{2/3}}{(t/t_0)^{1/3}} F_1' \left(2^{2/3} \frac{l - V_d t}{L_0(t/t_0)^{1/3}} \right). \quad (3)$$

Рис. 2 иллюстрирует следующую из уравнения (3) самоподобную эволюцию длин пробега, при которой профиль дислокации со временем смещается и уширяется.

Функция распределения (3) асимметрична с отрицательным средним значением, поэтому для зависимости от времени среднего смещения дислокации в нестационарном случае имеем

$$\bar{l} \approx V_d t - 0.76h(t/t_0)^{1/3}. \quad (4)$$

Расчет среднеквадратичной ширины профиля дает величину

$$w \approx 0.8h(t/t_0)^{1/3}, \quad t \gg t_0. \quad (5)$$

Отметим, что для рассматриваемой модели рассчитаны также корреляционные функции смещений дислокации в различных точках вдоль ее длины [8].

3. Что доступно экспериментальному наблюдению?

Подавляющее число экспериментальных исследований динамики индивидуальных дислокаций сконцентрировано на измерениях их среднего смещения в зависимости от времени приложения нагрузки. Такие данные дают возможность находить наиболее важную динамическую характеристику — скорость движения дислокации в целом V_d и изучать ее зависимость от различных параметров: напряжения, температуры и других. В теории эволюция со временем статистических свойств взвешенного по длине системы смещения линии $\bar{l} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N l_i$, характеризующего движение дислокации как целого, также

изучена [11]. Здесь подразумевается, что длина дислокации разбита на большое число $N \gg 1$ интервалов $i = 1, \dots, N$, набор смещений $\{l_i\}$ которых представляет форму дислокации с достаточной точностью. Однако усреднение по длине протяженной дислокации в значительной степени нивелирует флуктуации смещений. В частности, это приводит и к тому, что на основании измерения скорости дислокации трудно сделать выбор в пользу того или иного из упоминавшихся подходов к описанию ее профиля. Поэтому с точки зрения изучения роли стохастической составляющей процесса движения более удобным может оказаться экспериментальное изучение других, более сильно флуктуирующих величин. Например, индивидуальных смещений l_i .

Фактически при изучении пробегов дислокаций методом избирательного травления измеряется как раз подобная величина — смещение конца дислокации, выходящего на поверхность кристалла. С оговорками на искажения, вносимые влиянием поверхности, все же можно предположить, что при подходящей ее обработке статистические свойства смещения конца дислокации отражают профиль дислокации и могут быть описаны упоминаемой теорией или ее вариантами, относящимися к полупространству [10].

К настоящему времени имеются лишь единичные исследования распределений длин пробегов, измеряемых по смещениям дислокационных ямок травления на поверхности кристаллов полупроводников Ge и Si до и после приложения нагрузки (например, [5,23] и некоторые другие), поэтому о сколько-нибудь полном сопоставлении теории с экспериментом говорить рано. Некоторые факты все же следует отметить.

Во-первых, среднеквадратичное смещение w точки выхода дислокации на поверхность $w = ((l - \bar{l})^2)^{1/2}$ при использованных в экспериментах на Ge длинах пробегов до 500 мкм менялось в мезоскопическом интервале $\sim 2-25$ мкм, сравнительно доступном для измерений. Во-вторых, в работе [5] получено, что в то время как для скорости движения дислокации в целом имеет место стационарный режим, среднеквадратичное смещение w продолжает заметно расти со временем. Это свидетельствует о значительно большей длительности процесса релаксации формы дислокации, что может отражать предсказываемое теорией увеличение времени релаксации с длиной дислокации $t_r \approx t_0(L/L_0)^{2/3}$, так что нестационарный режим должен наблюдаться в расширенном интервале времени вплоть до $t \approx t_r \gg t_0$. По мнению авторов работы [5], ширина профиля растёт со временем как $w \propto t^{1/2}$, что несколько отличается от предсказываемой теорией зависимости $w \propto t^{1/3}$ для нестационарного режима. Причиной расхождения может быть, например, влияние наличия дефектов в образцах, что в рамках упрощенной модели описывалось в [23]. В пользу возможного влияния дефектов говорит также более медленное убывание хвостов измеренных в [5] распределений длин пробегов по сравнению с предписываемым теорией (см. уравнение (3)). Соответствующее

уширение распределений должно сказываться и на оценке среднеквадратичных смещений, приводя к их несколько более быстрому росту со временем. Возможно, что лучшее согласие с теорией имеется для центральных частей пиков гистограмм пробегов, например для такого параметра, как кривизна в максимуме пика. К сожалению, на имеющихся в настоящее время экспериментальных кривых недостаточно точек для проверки этого предположения. Поэтому крайне желательным является увеличение статистического массива соответствующих экспериментальных данных.

4. Заключение

Движение дислокаций в кристаллическом рельефе под нагрузкой представляет собой сложный стохастический процесс с участием многочисленных степеней свободы. Соответствующие закономерности являются предметом дискуссии исследователей. Наложение описывающей этот процесс модели на точно решенную задачу о распределении собственных значений случайных матриц позволяет внести в эту дискуссию ясность в пользу развития со временем шероховатости формы движущейся дислокации. Адаптация результатов математических работ дает в явном виде функцию распределения флуктуаций динамической формы дислокаций. Можно надеяться, что достигнутый значительный прогресс в теоретическом описании статистических свойств этих флуктуаций будет стимулировать экспериментальное исследование динамики дислокаций на более глубокой основе.

Благодаря предсказываемому теорией росту времени релаксации формы дислокации с ее размером многие статистические характеристики дислокации при достаточной ее протяженности L заметно превосходят микроскопические значения и могут изучаться на мезоскопическом уровне. В первую очередь это профиль движущейся дислокации, важнейшим параметром которого является его среднеквадратичная ширина. Имеющиеся к настоящему времени экспериментальные данные свидетельствуют о самоподобной эволюции этих величин. Наблюдающиеся отклонения от теоретических закономерностей сами по себе представляют интерес в плане изучения взаимодействия дислокаций с дефектами и контроля реальной структуры кристаллов.

Список литературы

- [1] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций* (М., Атомиздат, 1972).
- [2] H. Alexander. In: *Dislocations in solids*, ed. by F.R.N. Nabarro, (Amsterdam–Oxford–N.Y.–Tokyo, North-Holland, 1986) v. 7. chap. 35, p. 113.
- [3] H.R. Kolar, J.C.H. Spence, H. Alexander. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 4031 (1996).

- [4] А.А. Чернов. *Современная кристаллография*, под ред. Б.К. Вайнштейна, А.А. Чернова, Л.А. Шувалова (М., Наука, 1980) т. 3, с. 216.
- [5] И.Ф. Казо, В.А. Макара, Н.Н. Новиков. *Металлофизика*, **2**, 35 (1980).
- [6] G. Blatter, M.V. Feigel'man, V.B. Geshkenbein, A.I. Larkin, V.M. Vinokur. *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 1125 (1994).
- [7] T. Halpin-Healy, Y.-C. Zhang. *Phys. Reports*, **254**, 215 (1995).
- [8] P.L. Ferrari, A. Borodin, T. Sasamoto, M. Prähofer, H. Spohn. *Polynuclear growth on a flat substrate and edge scaling of GOE eigenvalues*. <http://www-m5.ma.tum.de/pers/ferrari/>.
- [9] P.L. Ferrari, M. Prähofer. *Markov Proc. Relat. Fields*, **12**, 203 (2006).
- [10] T. Sasamoto, T. Imamura. *J. St. Phys.*, **115**, 749 (2004).
- [11] B. Derrida, C. Appert. *J. St. Phys.*, **94**, 1 (1999).
- [12] А.Н. Колмогоров. *Изв. АН СССР. Сер. мат.*, № 3, 355 (1937).
- [13] W.A. Johnson, P.A. Mehl. *Trans. AIMME*, **135**, 416 (1939).
- [14] D. Kashchiev. *J. Cryst. Growth*, **40**, 29 (1977).
- [15] T.J. Newman, A. Volmer. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **29**, 2285 (1996).
- [16] E. Ben-Naim, A.R. Bishop, I. Daruka, P.I. Krapivsky. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **31**, 5001 (1998).
- [17] В.М. Чернов, Е.И. Персиянова. *ФТТ*, **50**, 624 (2008).
- [18] F.C. Frank. *J. Cryst. Growth*, **22**, 233 (1974).
- [19] N. Goldenfeld. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **17**, 2807 (1984).
- [20] D. Kim. *Phys. Rev. E*, **52**, 3512 (1995).
- [21] K. Lin, D.C. Chrzan. *Phys. Rev. B*, **60**, 3799 (1999-II).
- [22] M. Prähofer. *Tables to: Exact scaling functions for one-dimensional stationary KPZ growth*. <http://www-m5.ma.tum.de> (2003).
- [23] В.А. Макара, Б.В. Петухов. *ФТТ*, **24**, 3458 (1982).

Редактор Л.В. Беляков

Mesoscopic variance of dislocation displacements in semiconductor crystals

B.V. Petukhov

Shubnikov Institute of Crystallography,
Russian Academy of Sciences,
119333 Moscow, Russia

Abstract It is shown that experimentally discovered great variance of dislocation displacements and long time of its relaxation to the stationary value in semiconductor materials can be explained by the stochastic nature of the thermally activated dislocation kinks nucleation. This stochasticity leads to the development of dislocation line roughening described by scaling relations including mesoscopic time and space scales.