

Библиографические ссылки

1. Охтилев М. Ю., Соколов Б. В., Юсупов Р. М. Интеллектуальные технологии мониторинга и управления структурной динамикой сложных технических объектов. М.: Наука, 2006.
2. Спесивцев А. В. Металлургический процесс как объект изучения: новые концепции, системность, практика. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2004.
3. Плавка в жидкой ванне / А. В. Ванюков, В. П. Быстров, А. Д. Васкевич и др.; под ред. А. В. Ванюкова. М.: Металлургия, 1988.
4. Костин Е. В., Писарев А. И. Подготовка статистических данных для построения нейросетевой модели процесса плавки в печах Ванюкова // Науч. вестник Норильского индустр. ин-та. 2011. № 9. С. 45–49.
5. Kohonen T. Self-Organizing Maps, Springer, 1995.
6. Вороновский Г. К. Генетические алгоритмы, искусственные нейронные сети и проблемы виртуальной реальности. Харьков: Основа, 1997.

References

1. Okhtilev M., Sokolov B. V., Yusupov R. M. *Intellektualnyye tekhnologii monitoringa i upravleniya strukturnoy dinamikoj slozhnykh tekhnicheskix obektov* (Intelligent technologies for monitoring and control of structural dynamics of complex technical objects). Moscow, Nauka, 2006, 410 p.
2. Spesivtsev A. V. *Metallurgicheskiy protsess kak ob'yekt izucheniya: novyye kontseptsii, sistemnost', praktika* (The steel making process as an object of study: new concepts, consistency, practice). SPb., Izd-vo Politekh. un-ta, 2004, 306 p.
3. Vanyukov A. V., Bystrov V. P., Vaskevich A. D. et al. *Plavka v zhidkoy vanne* (Melting in a liquid bath). Moscow, Metallurgy, 1988.
4. Kostin E. V., Pisarev A. I. *Nauchnyj vestnik noril'skogo industrial'nogo instituta*. 2011, № 9, pp. 45–49.
5. Kohonen T. *Self-Organizing Maps*, Springer, 1995.
6. Voronovskiy G. K. *Geneticheskiye algoritmy, iskusstvennyye neyronnyye seti i problemy virtual'noy real'nosti* (Genetic algorithms, neural networks, artificial and virtual reality problems). Khar'kov, Osnova, 1997, 112 p.

© Костин Е. В., 2013

УДК 548.571

ВЛИЯНИЕ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Ю. Ю. Логинов¹, А. В. Можжерин¹, А. В. Брильков²¹Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М. Ф. Решетнева Россия, 660014, Красноярск, просп. им. газ. «Красноярский рабочий», 31. E-mail: loginov@sibsau.ru²Сибирский федеральный университет Россия, 660041, Красноярск, просп. Свободный, 79. E-mail: abrilkov@sfu-kras.ru

Методом просвечивающей электронной микроскопии исследованы закономерности образования структурных дефектов в полупроводниках CdTe, HgTe, ZnTe, ZnSe, ZnS, Si и GaAs. Установлено, что при одних и тех же условиях обработки в полупроводниках группы A₂B₆ образуются дефекты наибольших размеров и с более высокой плотностью по сравнению с Si и GaAs. При этом степень нарушений кристаллической решетки и интенсивность дефектообразования убывает в следующей последовательности: от ZnS → ZnSe ≈ CdS → CdTe ≈ HgTe → ZnTe → GaAs ≈ Si. Экспериментальные результаты объясняются на основе анализа упругих напряжений, создаваемых в материале в результате образования структурных дефектов.

Ключевые слова: структурные дефекты, упругие постоянные, электронная микроскопия, полупроводники.

EFFECT OF ELASTIC STRESSES ON THE FORMATION OF STRUCTURAL DEFECTS IN SEMICONDUCTORS

Yu. Yu. Loginov¹, A. V. Mozherin¹, A. V. Brilikov²¹Siberian State Aerospace University named after Academician M. F. Reshetnev 31 "Krasnoyarskiy Rabochiy" prosp., Krasnoyarsk, 660014, Russia. E-mail: loginov@sibsau.ru²Siberian Federal University 79 Svobodnyi prosp., Krasnoyarsk, 660041, Russia. E-mail: abrilkov@sfu-kras.ru

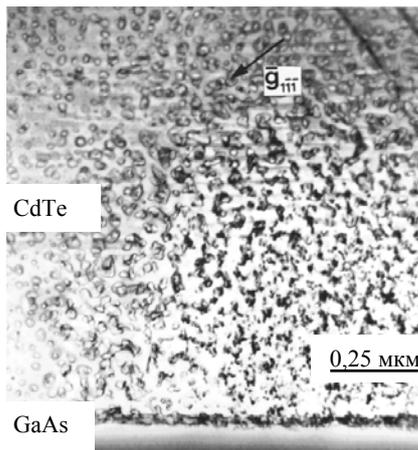
The structural defects formation in semiconductors CdTe, HgTe, ZnTe, ZnSe, ZnS, Si and GaAs were investigated by method of transmission electron microscopy. It is found that the same processing conditions in semiconductors A₂B₆ defects are formed with largest dimensions and higher density as compared with Si and GaAs. The degree of crystal lattice irregularities and defect formation intensity decreases in the following order of ZnS → ZnSe ≈ CdS → CdTe ≈ HgTe → ZnTe to GaAs and Si. The experimental results are explained on the basis of analysis of the elastic stresses in the material generated as a result of the formation of structural defects.

Keywords: structural defects, the elastic constants, electron microscopy, semiconductors.

Полупроводниковые материалы и приборы широко применяются в космических аппаратах, устройствах электроники, изготовлении солнечных элементов [1]. В процессе выращивания полупроводниковых кристаллов и эпитаксиальных структур, облучения и термообработки в них формируются структурные дефекты, размеры и плотность которых зависят от условий обработки и природы материалов [1; 2]. Методом просвечивающей электронной микроскопии установлено, что при сравнении полупроводников группы A_2B_6 (CdTe, HgTe, ZnTe, ZnSe, ZnS), кремния и GaAs при идентичных условиях обработки наиболее интенсивное дефектообразование наблюдается в полупроводниках A_2B_6 , а не в Si и GaAs [2]. Легче всего процесс дефектообразования происходит в ZnS и CdS, в которых образуются дефекты с наибольшими размерами и высокой плотностью. Труднее всего процесс дефектообразования происходит в Si и GaAs, в которых наблюдаются дефекты с небольшими размерами и меньшей плотностью.

В данной работе методом просвечивающей электронной микроскопии исследованы полупроводниковые кристаллы CdTe, HgTe, ZnTe, ZnSe, ZnS, Si и GaAs.

На рисунке показаны структурные дефекты, образующиеся в CdTe, выращенном методом металл-органической парафазовой эпитаксии на монокристаллической подложке GaAs, в результате облучения структуры CdTe/GaAs электронами с энергией 100 кэВ непосредственно в электронном микроскопе. Дефекты представляют собой преимущественно скопления вакансий в виде пор и скопления атомов в форме темных образований. Непосредственно на границе «эпитаксиальный слой – подложка» также формируется переходный слой толщиной $\Delta x \approx 35$ нм, который расширяется с ростом дозы облучения и связан со стоком точечных дефектов на границу раздела. Каких-либо изменений в GaAs не происходит, т. е. GaAs является радиационно-стойким материалом к облучению электронами данной энергией.



Формирование структурных дефектов в CdTe, выращенном на подложке GaAs, при облучении электронами с энергией 100 кэВ, интенсивностью $4,7 \cdot 10^{18}$ электрон/($\text{см}^2 \cdot \text{с}$), потоком $2,5 \cdot 10^{21}$ электрон/см²

В результате электронно-микроскопических исследований установлено, что степень нарушений в полупроводниках уменьшается от ZnS \rightarrow ZnSe \approx CdS \rightarrow CdTe \approx HgTe \rightarrow ZnTe \rightarrow GaAs \approx Si, что можно объяс-

нить увеличением значения энергии дефекта упаковки (ЭДУ) материалов [2]. При этом размеры скоплений вакансий и междоузельных дефектов в виде пор и дислокационных петель больше в CdTe, чем в других исследованных полупроводниках A_2B_6 , и значительно меньше в Si и GaAs при идентичных условиях обработки.

С точки зрения упругих напряжений, создаваемых в материале в результате образования структурных дефектов, можно рассчитать плотность внутренней энергии U , связанной с образованием скоплений точечных дефектов. Зная компоненты тензоров модулей упругости C_{ijkl} и податливости S_{ijkl} , выражение можно записать в общем виде [3]:

$$U = \frac{1}{2} S_{ijkl} A_{ijkl}^{\sigma}, \quad (1)$$

где A_{ijkl}^{σ} – тензор дисперсии внутренних напряжений, связанных со структурными дефектами. Для кристаллов с кубической симметрией, содержащих скопления вакансий или междоузельных атомов в виде дисков или дислокационных петель, значение U можно вычислить по формуле [3]:

$$U = \frac{g^2}{30} [L(S_{11} + 2S_{12}) + 11S_{11} + 7S_{44}], \quad (2)$$

где $g^2 = \frac{\delta b^2 \langle \mu \rangle^2}{h^2}$; здесь δ – относительный объем, занятый дислокационными дисками, b – величина вектора Бюргера, $L = 96m^2 - 64m + 7$; здесь $m = 2 \frac{3\langle K \rangle + \langle \mu \rangle}{3\langle K \rangle + 4\langle \mu \rangle}$, h – толщина дисков, $\langle K \rangle, \langle \mu \rangle$ – усредненные значения объемного модуля упругости и модуля сдвига, которые в случае кубической симметрии определяются стандартными выражениями:

$$\langle K \rangle = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}),$$

$$\langle \mu \rangle = \frac{1}{5}[(C_{11} - C_{12}) + 3C_{44}]. \quad (3)$$

Принимая $h \approx b$ и зная упругие постоянные [3; 4] (табл. 1) можно рассчитать плотность внутренней энергии на единицу относительного объема, занимаемого структурными дефектами, U/δ , например, при 300 К.

В табл. 2 приведены расчетные значения U/δ для исследованных материалов. Из табл. 2 видно, что U/δ меньше в CdTe и HgTe, затем несколько выше в ZnTe, ZnS и ZnSe и значительно больше в GaAs и Si.

Таким образом, из упругих свойств рассмотренных материалов следует, что в полупроводниках A_2B_6 энергетически оправданно образование скоплений точечных дефектов с размерами больше, чем в Si и GaAs, а скопления вакансий или междоузельных атомов в виде дисков в CdTe и HgTe могут занимать больший относительный объем, чем в ZnS, ZnTe или ZnSe. Это согласуется с экспериментальными данными, когда при идентичных условиях облучения электронами размеры образующихся скоплений точечных дефектов в CdTe больше, чем в ZnTe, ZnS и ZnSe, и практически равны нулю в Si и GaAs [2].

Таблица 1

Упругие постоянные C_{ij} (10^{10} Н/м²) и S_{ij} (10^{-11} м²/Н) соединений A_2B_6 , GaAs и Si

Материал (кубич. сист.)	C_{11}	C_{12}	C_{44}	S_{11}	S_{12}	S_{44}
CdTe	5,35	3,69	2,02	4,27	-1,74	4,95
HgTe	5,32	3,68	2,08	4,33	-1,77	4,80
ZnTe	7,15	4,08	3,11	2,39	-0,85	3,25
ZnSe	8,50	5,02	4,07	2,11	-0,78	2,46
ZnS	10,10	6,44	4,43	1,97	-0,76	2,26
GaAs	11,80	5,35	5,94	1,175	-0,366	1,68
Si	16,50	6,40	7,92	0,774	-0,216	1,26

Таблица 2

Значения упругих параметров $\langle K \rangle$, $\langle \mu \rangle$, m , L и U/δ для исследованных полупроводников A_2B_6 , Si и GaAs

Материал	$\langle K \rangle$, 10^{10} Н/м ²	$\langle \mu \rangle$, 10^{10} Н/м ²	m	L	U/δ , 10^{10} Дж/м ³
CdTe	4,243	1,544	1,509	129,305	1,46
HgTe	4,23	1,576	1,50	127,0	1,50
ZnTe	5,10	2,48	1,41	107,62	2,527
ZnSe	6,18	3,14	1,394	104,33	3,21
ZnS	7,66	3,39	1,44	113,906	3,40
GaAs	7,50	4,854	1,31	87,91	5,0
Si	9,77	6,77	1,28	82,37	6,95

С ростом температуры размеры скоплений точечных дефектов будут увеличиваться, поскольку численные значения упругих постоянных C_{ij} и S_{ij} при этом уменьшаются [3; 4], а следовательно, уменьшается и величина U/δ . Так, значение U/δ в CdTe составляет $3,42 \cdot 10^{10}$ и $1,42 \cdot 10^{10}$ Дж/м³ при 77 и 300 К соответственно. Это проявляется, в частности, в укрупнении пор, образовавшихся в ZnS, CdTe и CdS в результате электронного облучения, при последующем термоотжиге, что наблюдалось нами ранее [2].

Таким образом, проводя анализ упругих постоянных, можно объяснить обнаруженную закономерность образования структурных дефектов в полупроводниках CdTe, HgTe, ZnTe, ZnSe, ZnS, GaAs и Si.

Библиографические ссылки

1. Нанотехнологии в полупроводниковой электронике / под ред. А. Л. Асеева. Новосибирск : Изд-во СО РАН, 2004.

2. Логинов Ю. Ю., Браун П. Д., Дьюроуз К. Закономерности образования структурных дефектов в полупроводниках A_2B_6 . М. : Логос, 2003.

3. Шермергор Т. Д. Теория упругости микронеоднородных сред. М. : Наука, 1977.

4. Landolet-Bornstein Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Group III. Crystal and Solid State Physics / Ed. K.-H. Hellwege. Berlin ; Heidelberg ; NewYork : Springer-Verlag, 1979.

References

1. *Nanotehnologii v poluprovodnikovoi elektronike* (Nanotechnology in semiconductor electronics). Ed. A. L. Aseev. Novosibirsk, SO RAN, 2004. 368 с.

2. Loginov Y. Y., Brown P. D., Durose K. *Zakonomernosti formirovaniya strukturnih defektov v poluprovodnikah A_2B_6* (The structural defect formation in semiconductors A_2B_6). Moscow, Logos, 2003, 304 p.

3. Shermergor T. D. *Teoria uprugosti mikroneodnorodnih sred* (The theory of elasticity of microinhomogeneous media). Moscow, Nauka, 1977, 400 p.

4. Landolet-Bornstein numerical data and functional relationships in science and technology. Group III. Crystal and solid state physics. Ed. K.-H. Hellwege. Berlin; Heidelberg; NewYork, Springer-Verlag, 1979, vol. 11, 854 p.

© Логинов Ю. Ю., Мозжерин А. В., Брильков А. В., 2013