Структура ядра недиссоциированных 60° дислокаций

Гутаковский А.К.^{1,2}, Вдовин В.И.¹, Федина Л.И.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

DOI 10.34077/Semicond2019-307

Дислокации в полупроводниках являются важным структурным элементом, который обеспечивает релаксацию напряжений в кристалле, возникающих, как при синтезе объемных материалов, гетероэпитаксиальных и низкоразмерных систем, так и при различных термических и радиационных воздействиях. Основным механизмом релаксации напряжений является скольжение дислокаций, приводящее к пластической деформации кристаллической решетки. В рамках классической концепции BDT (brittle-ductile transition) для материалов с алмазоподобной структурой при переходе от хрупкого разрушения к пластическому течению скольжение должно осуществляться посредством диссоциированных 60° дислокаций [1]. Однако в реальности пластическая релаксация напряженных полупроводниковых гетероструктур и шоковые воздействия сопровождается скольжением недиссоциированных (полных) 60° дислокаций [2-6]. Исходя из первопринципных расчетов, существует четыре возможных конфигураций ядра такой дислокации (S1, S2, S3, G), но лишь одна из них, - метастабильная S1, является скользящей, тогда как остальные являются сидячими [7]. Это предполагает, что S1 дислокация является скользящей во всем интервале температур. Действительно, как показано в [6], S1 тип ядра наблюдается для 60° дислокаций, возникающих вблизи фронта кристаллизации при срыве роста Fz-Si. Однако в других процессах структура ядра полных 60° дислокаций пока не установлена.

В докладе с использованием данных высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии (ВРЭМ), включающих цифровой анализ ВРЭМ изображений и построение карт распределения напряжений в ядре дислокации [8], представлен сравнительный анализ атомной структуры ядра скользящих недиссоциированных 60° дислокаций в Fz-Si, введенных термическим ударом, и возникающих при релаксации напряженных $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}/\text{Si}(001)$ гетероструктур. В обоих случаях показана их идентичность и соответствие S1 типу дислокации. Ядро такой дислокации состоит из восьмизвенного кольца, содержащего атом с одной оборванной связью, и характеризуется выраженной асимметрией поля напряжений в ядре, связанной с локализацией в ядре двух различных экстраплоскостей $\{001\}$ и $\{111\}$ (рис.).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№19-72-30023)

[1] T. Okuno and H. Saka *J Mater. Sci.* **48**, 115 (2013).

[2] Y. B. Bolkhovityanov, et al., *Phil. Mag. Lett.*, **96**, 361, (2016).

[3] S. Izumi, et al., *Phil. Mag. Lett.* **90**, 707 (2010).

[4] J. Rabier, et al., *Phys. Stat. Sol.(c)* **10**, 11 (2013)

[5] C.W. Zhao et al., *Appl Phys A* **105**, 207 (2011).

[6] L. I. Fedina, A. K. Gutakovskii, and T. S. Shamirzaev, *JAP* **124**, 053106 (2018);

[7] L. Pizzagalli, J. Godet, S. Brochard, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 065505 (2009).

[8] A.K. Gutakovskii, A.L. Chuvilin, and S.A. Song, *Bull. Russian Acad. Sci.: Phys.* **71**, 1426. (2007)

Рис.1. — Карта распределения деформаций в ядре S1 дислокации.