Ф И З И К А

УДК 548.55

КАЛИБРОВОЧНАЯ ТЕОРИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ

Н. М. Богатов[1], ***А. П. Савченко***[2]

GAUGE THEORY OF DISLOCATIONS DISTRIBUTION

Bogatov N. M., Savchenko A. P.

The macroscopic distribution of dislocations in the bulk of a crystal has been studied theoretically. The model of a rectangular crystal with cubic symmetry has been considered. The application of the gauge theory of structural defects has made it possible to solve the problem of dislocations distribution along the Y-axis for symmetric boundary conditions. Solutions of the following types have been found: periodical, decaying, and decaying with oscillations. The characteristic length of the motion for dislocations in silicon has been calculated.

Введение

Полупроводниковые материалы широко используются в приборах твердотельной электроники. Электрофизические свойства этих материалов обладают структурной чувствительностью. Дислокации в твердых телах образуются в процессе выращивания кристаллов, термических и механических воздействий. Изучение процессов образования и распространения структурных дефектов является актуальным направлением физики деформированных сред.

Образование дефектов, связанных с нарушением симметрии твердого тела, можно рассматривать с позиции теории калибровочных полей. Для описания дислокаций и дисклинаций предложена теория, использующая калибровочные поля Янга–Миллса [1]. В работе [2] дисклинации трактуются как поворотные дефекты. С этим не согласны авторы работы [3], которые считают дислокации и дисклинации трансляционными нарушениями симметрии. В статье [4] для описания дислокаций используются комплексные поля Хиггса и проводится аналогия с квантовой электродинамикой. Квантовая теория дислокаций предложена также в [5]. В [6] построена калибровочная теория структурных дефектов, основанная на геометрии расслоенного пространства, выявлена релаксация термических напряжений за счет образования дислокаций.

Целью работы является теоретическое исследование на основе калибровочной теории [6] макроскопического распределения дислокаций в кристалле при заданной их поверхностной концентрации.

1. Калибровочная теория структурных дефектов

Калибровочная теория дефектов [6] объединяет теоретико-физический и геометрический подходы при решении задач дефектообразования в твердых телах. С точки зрения калибровочной теории дефекты структуры рассматриваются как следствие неоднородности действия группы Ли калибровочных преобразований $G = GL(3,R) \triangleright T(3)$. Упругий континуум с дефектами отображается в 4-мерное пространство расслоенного пространства $L_{4,5}$. База пространства $L_{4,5}$ есть вещественное 4-мерное евклидово пространство R_4 с локальным репером $\mathbf{e}_\alpha$, $\alpha = 0,1,2,3$. Слой пространства $L_{4,5}$ — вещественное 5-

[1]Богатов Николай Маркович, д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой общей физики и информационных систем физико-технического факультета Кубанского государственного университета.

[2]Савченко Андрей Павлович, аспирант Кубанского государственного университета.

мерное пространство аффинной связности L_5 с локальным базисом, заданным в каждой точке пространства R_4, с полем объекта связности $A_{\beta\,(\nu)}^{(\mu)}$ и компонентами метрического тензора.

Распределение дислокаций описывается следующими величинами: $E_s^{(k)} = -\frac{1}{2}e_{sij}P^{ij(k)}$ и $H^{j(k)} = P^{0j(k)}$, где $P^{ij(k)}$ — поток пространственного тензора плотности дефектов в направлении i; $P^{0j(k)}$ — k-компонента суммарного вектора Бюргерса дефектов, пересекающих единичную площадку с вектором нормали в направлении j, или пространственный тензор плотности дефектов. Компоненты тензора плотности дефектов $\mathbf{P}$ выражаются через тензор кривизны пространства L_5 [6]. Система уравнений для $E_s^{(k)}$ и $H^{j(k)}$ следует из полевых уравнений теории [6] и имеет структуру уравнений Максвелла:

$$\begin{cases} e^{jbc}\partial_b H_c^{(k)} = \partial_0 E^{j(k)} + \frac{1}{2s_2}\Sigma^{jb}\delta_b^{(k)}, \\ e^{jbc}\partial_b E_c^{(k)} = -\partial_0 H^{j(k)}, \\ \partial_j H^{j(k)} = 0, \\ \partial_j E^{j(k)} = -\frac{1}{2s_2}\rho c^2 B_0^{(k)}. \end{cases}$$

В стационарном случае в области пластичности при условии постоянства упругих и термомеханических свойств кристалла она сводится к уравнению

$$\partial_a\left[\left[\partial_b H_c^{(k)}\right]g^{ab}\right]g^{cs} - \\ - \frac{1}{2s_2}c_m^{(k)sq}H^{mp}g_{pq} = 0, \quad (1.1)$$

где g^{ij} — компоненты метрического тензора евклидова пространства; s_2 — константа связи, характеризующая пластические свойства тела; $c_m^{(k)sq}$ — коэффициенты упругой жесткости кристалла.

Плотность дислокаций с компонентой вектора Бюргерса $b^{(k)}$, пересекающих поверхность ленты с нормалью в направлении i, определяется формулой

$$N_D = \left|\frac{P^{0i(k)}}{b^{(k)}}\right|. \quad (1.2)$$

Уравнение (1.1) представляет собой систему девяти однородных дифференциальных уравнений второго порядка относительно $H^{s(k)}$. Диагональные компоненты тензора $H^{s(s)}$ описывают макроскопическое распределение винтовых дислокаций, недиагональные $H^{s(k)}$ — макроскопическое распределение краевых дислокаций.

2. Распределение дислокаций в объеме кристалла

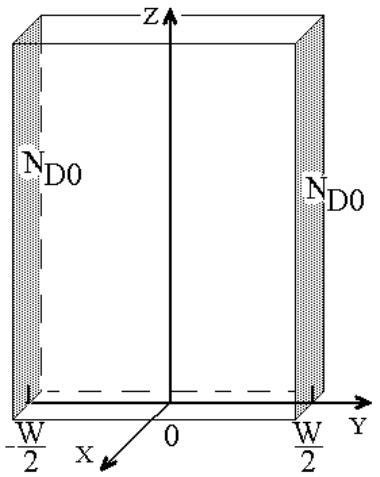


Рис. 1. Схема кристалла с заданной на гранях $y = -W/2$ и $y = W/2$ плотностью дислокаций

Рассмотрим кристалл кубической симметрии прямоугольной формы шириной W с ориентацией поверхности (100) в декартовой системе координат X, Y, Z (рис. 1).

Пусть распределение дислокаций неоднородно вдоль оси Y. Представим решение уравнения (1.1) в виде

$$H^{s(k)} = A^{s(k)}\exp(iky), \quad (2.1)$$

где $A^{s(k)}$ — константы; k — решение характеристического уравнения.

$$-k^2A^{s(k)} - \frac{1}{2s_2}c_p^{s(k)}{}_{(q)}A^{p(q)} = 0. \quad (2.2)$$

Линиям краевых дислокаций, перпендикулярным оси Y, соответствуют компоненты $H^{1(3)}$ и $H^{3(1)}$. Для коэффициентов $A^{1(3)}$ и $A^{3(1)}$ из (2.2) получим систему уравнений, которая с учетом отличных от нуля коэффициентов упругой жесткости кристалла имеет

вид

$$\begin{cases} -k^2 A^{1(3)} - \dfrac{1}{2s_2}(C_{13}A^{1(3)} + \\ \qquad + C_{55}A^{3(1)}) = 0, \\ -k^2 A^{3(1)} - \dfrac{1}{2s_2}(C_{13}A^{1(3)} + \\ \qquad + C_{55}A^{3(1)}) = 0, \end{cases} \tag{2.3}$$

где введены обозначения $C_{13} = \dfrac{c_1^{1(3)}}{2s_2}$, $C_{55} = \dfrac{c_3^{1(3)}}{2s_2}$; коэффициенты C_{ij} симметричны относительно перестановки индексов.

Семейства коэффициентов k, при которых определитель системы (2.3) обращается в нуль: $k_{1,2} = \pm\sqrt{C_{55} - C_{13}}$, $k_{3,4} = \pm i\sqrt{C_{55} + C_{13}}$. В качестве независимой переменной выберем коэффициент $A^{1(3)}$, тогда для любого из найденных k выполняется равенство

$$A^{3(1)} = -\frac{A^{1(3)}}{C_{55}}(k^2 + C_{13}). \tag{2.4}$$

С помощью (1.2) перейдем от компонент тензора $\mathbf{H}$ к скалярной плотности дислокаций N_D. С учетом найденных k выделим два класса решений, а именно:

$$N_{1D} = A_1^{1(3)}\cos(\alpha y) + A_2^{1(3)}\sin(\alpha y),$$

$$N_{2D} = A_3^{1(3)}\,\mathrm{ch}(\beta y) + A_4^{1(3)}\,\mathrm{sh}(\beta y),$$

где $\alpha = \sqrt{C_{55} - C_{12}}$; $\beta = \sqrt{C_{55} + C_{12}}$.

На гранях кристалла $y = -W/2$ и $y = W/2$ зададим поверхностную плотность дислокаций:

$$N_D\left(-\frac{W}{2}\right) = N_D\left(\frac{W}{2}\right) = N_{D0}. \tag{2.5}$$

Из краевых условий (2.5) найдем независимые коэффициенты $A^{1(3)}$ для обоих классов решений:

$$A_1^{1(3)} = \frac{N_{D0}}{\cos(\alpha\frac{W}{2})}, \quad A_2^{1(3)} = 0,$$

$$A_3^{1(3)} = \frac{N_{D0}}{\mathrm{ch}(\beta\frac{W}{2})}, \quad A_4^{1(3)} = 0.$$

С учетом (2.4) соответствующие коэффициенты $A^{3(1)}$ равны

$$A_1^{3(1)} = -A_1^{1(3)}, \quad A_2^{3(1)} = 0,$$

$$A_3^{3(1)} = A_3^{3(1)}, \quad A_4^{3(1)} = 0.$$

В результате каждой из компонент $H^{1(3)}$ и $H^{3(1)}$ соответствует два класса решений, описывающих распределение краевых дислокаций вдоль оси Y. Первый класс — периодические решения:

$$N_{1D} = \pm\frac{N_{D0}}{\cos(\alpha\frac{l}{2})}\cos(\alpha y),$$

второй класс — убывающие в объеме решения:

$$N_{2D} = \frac{N_{D0}}{\mathrm{ch}(\beta\frac{l}{2})}\,\mathrm{ch}(\beta y).$$

Рассмотрим далее распределение винтовых дислокаций. Винтовые дислокации, линии которых перпендикулярны оси Y, описываются компонентами $H^{1(1)}$ и $H^{3(3)}$. Из (2.2) выделим систему уравнений, содержащих соответствующие коэффициенты $A^{s(s)}$:

$$\begin{cases} -k^2 A^{1(1)} - (C_{11}A^{1(1)} + \\ \qquad + C_{66}A^{2(2)} + C_{55}A^{3(3)}) = 0, \\ -k^2 A^{2(2)} - (C_{11}A^{1(1)} + \\ \qquad + C_{66}A^{2(2)} + C_{55}A^{3(3)}) = 0, \\ -k^2 A^{3(3)} - (C_{11}A^{1(1)} + \\ \qquad + C_{66}A^{2(2)} + C_{55}A^{3(3)}) = 0, \end{cases} \tag{2.6}$$

где $C_{11} = \dfrac{c_1^{1(1)}}{2s_2}$; $C_{66} = \dfrac{c_2^{1(2)}}{2s_2}$.

Определитель системы (2.6) обращается в нуль при следующих k: $k_{1,2} = \pm i\gamma$, $k_{3,4} = \pm(\varphi - i\psi)$, $k_{5,6} = \pm(\varphi + i\psi)$, где γ, ϕ, ψ — положительные действительные величины:

$$\gamma = \Gamma^+ - C_{11}, \quad \varphi = -\frac{1}{2}\Gamma^+ - C_{11}, \quad \psi = \frac{\sqrt{3}}{2}\Gamma^-,$$

где

$$\Gamma^{\pm} = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}} \pm \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}}.$$

Здесь $q = 2C_{11}^3 - 6C_{11}C_{66}^2 + 6C_{66}^3$; $Q = (2C_{11}^3 - 6C_{11}C_{66}^2 + 6C_{66}^3)^2 - C_{66}^6$.

Выберем в качестве независимой переменной коэффициент $A^{1(1)}$, тогда из системы уравнений (2.6) следует

$$A^{2(2)} = A^{1(1)}, \quad A^{3(3)} = A^{1(1)}. \tag{2.7}$$

Переходя с помощью (1.2) к скалярной плотности дислокаций N_D, выделим три класса решений, а именно:

$$N_{1D} = A_1^{1(1)} \operatorname{ch}(\gamma y) + A_2^{1(1)} \operatorname{sh}(\gamma y),$$

$$N_{2D} = A_3^{1(1)} \exp(\psi y) \cos(\varphi y) + A_4^{1(1)} \exp(-\psi y) \cos(\varphi y),$$

$$N_{3D} = A_5^{1(1)} \exp(\psi y) \sin(\varphi y) + A_6^{1(1)} \exp(-\psi y) \sin(\varphi y).$$

Воспользовавшись краевыми условиями (2.5), найдем коэффициенты $A^{1(1)}$:

$$A_1^{1(1)} = \frac{N_{D0}}{\operatorname{ch}(\gamma \frac{W}{2})}, \quad A_2^{1(1)} = 0,$$

$$A_3^{1(1)} = \frac{N_{D0}}{\left(\exp(-\psi \frac{W}{2}) + \exp(\psi \frac{W}{2})\right) \cos(\varphi \frac{W}{2})},$$

$$A_4^{1(1)} = A_3^{1(1)},$$

$$A_5^{1(1)} = \frac{N_{D0}}{\left(\exp(-\psi \frac{W}{2}) + \exp(\psi \frac{W}{2})\right) \sin(\varphi \frac{W}{2})},$$

$$A_6^{1(1)} = -A_5^{1(1)}.$$

В силу равенств (2.7) каждой из диагональных компонент тензора плотности дислокаций $H^{s(s)}$ соответствуют следующие решения. Первый класс — монотонно затухающие в объеме решения:

$$N_{1D} = \frac{N_{D0}}{\operatorname{ch}(\gamma \frac{W}{2})} \operatorname{ch}(\gamma y).$$

Второй и третий классы — затухающие решения с осцилляциями:

$$N_{2D} = \frac{N_{D0}}{\operatorname{ch}\left(\psi \frac{W}{2}\right) \cos\left(\varphi \frac{W}{2}\right)} \operatorname{ch}(\psi y) \cos(\varphi y),$$

$$N_{3D} = \frac{N_{D0}}{\operatorname{ch}(\psi \frac{W}{2}) \sin(\varphi \frac{W}{2})} \operatorname{sh}(\psi y) \sin(\varphi y).$$

Найдем распределение плотности дислокаций в пластине кремния шириной $W = 0,012$ см. Коэффициенты $c_m^{(k)sq}$ выразим через коэффициенты упругой податливости кремния [7], значение константы связи s_2 вычислено в [6]. Распределение плотности дислокаций на поверхности (100) вдоль координаты y представлено следующими иллюстрациями: рис. 2 — поверхностная плотность краевых дислокаций N_D (решение 2-го типа); рис. 3 — поверхностная плотность винтовых дислокаций N_D (решение 1-го типа); рис. 4 — поверхностная плотность винтовых дислокаций N_D (решения 2-го и 3-го типа); рис. 5 — область наибольшего изменения поверхностной плотности винтовых дислокаций для различных N_{D0} (решение 2-го типа).

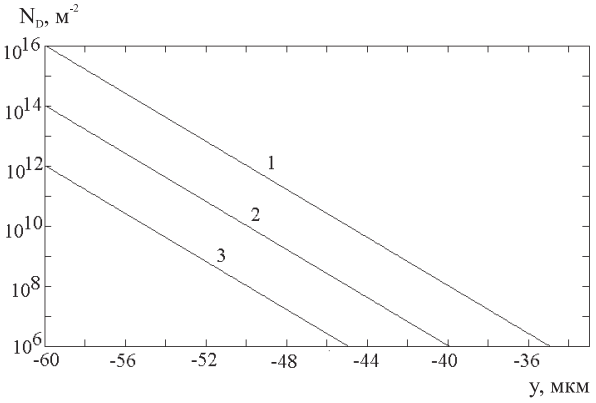


Рис. 2. Плотность краевых дислокаций на поверхности (100) кристалла: *1* — $N_{D0} = 10^16\text{м}^{-2}$; *2* — $N_{D0} = 10^14\text{м}^{-2}$; *3* — $N_{D0} = 10^{12}\text{м}^{-2}$

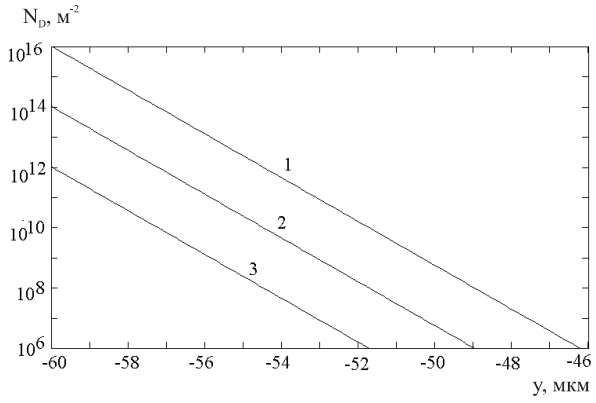


Рис. 3. Плотность винтовых дислокаций на поверхности (100) кристалла (решение 1-го типа): *1* — $N_{D0} = 10^16\text{м}^{-2}$; *2* — $N_{D0} = 10^14\text{м}^{-2}$; *3* — $N_{D0} = 10^{12}\text{м}^{-2}$

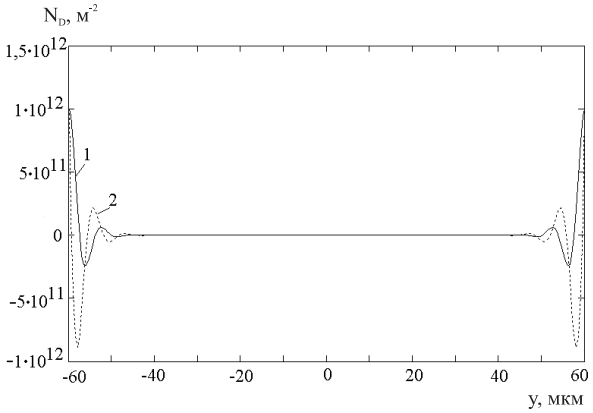


Рис. 4. Плотность винтовых дислокаций на поверхности (100) кристалла: *1* — решение 2-го типа; *2* — решение 3-го типа; $N_{D0} = 10^{12}$м$^{-2}$

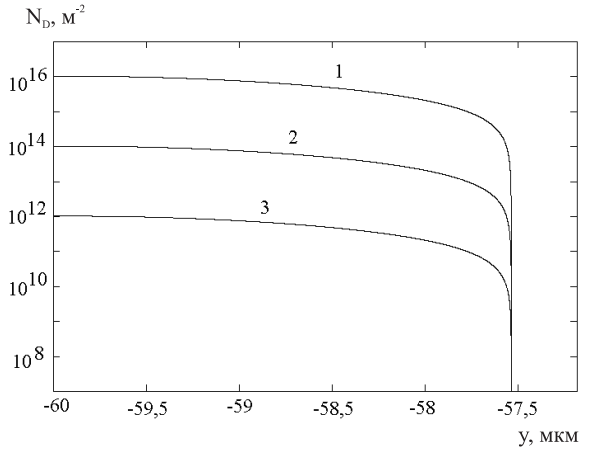


Рис. 5. Плотность винтовых дислокаций на поверхности (100) кристалла (решение 2-го типа): (*1* — $N_{D0} = 10^{16}$м$^{-2}$; *2* — $N_{D0} = 10^{14}$м$^{-2}$; *3* — $N_{D0} = 10^{12}$м$^{-2}$

Спад плотности дислокаций от 10^{16} м$^{-2}$ до 10^6 м$^{-2}$ происходит на интервалах: 14 мкм (рис. 3) и 2,5 мкм (рис. 5) для винтовых дислокаций; 25 мкм (рис. 2) для краевых дислокаций.

Длина волны λ периодического решения для краевых дислокаций определяется значениями коэффициентов упругой жесткости кристалла, для кремния $\lambda = 6,8$ мкм. Волновой механизм распространения пластических деформаций рассматривался в работах [8, 9].

Монотонно убывающие решения (рис. 2, 3) описывают распределение как краевых, так и винтовых дислокаций. Коэффициенты пространственного затухания β и γ постоянны по всей ширине образца и определяются упруго-пластическими свойствами кристалла. Рассчитанные значения для краевых дислокаций $\beta = 1,45$ мкм$^{-1}$; для винтовых дислокаций $\gamma = 2,76$ мкм$^{-1}$.

Для винтовых дислокаций существует два класса затухающих осциллирующих решений (рис. 4). Коэффициент затухания для этих решений выражается константой $\psi = 1,38$ мкм$^{-1}$. Длина волны осцилляций также зависит от упруго-пластических свойств материала и имеет значение 7,4 мкм.

Выводы

Решение уравнений калибровочной теории с краевыми условиями, заданными на гранях y $= \pm W/2$, приводит к следующим механизмам распределения дислокаций вдоль оси Y: монотонно убывающие решения существуют как для краевых, так и для винтовых дислокаций; убывающие решения с осцилляциями — только для винтовых дислокаций; волновые решения — только для краевых дислокаций.

Период осцилляций и коэффициенты затухания плотности дефектов зависят от упругих свойств материала и константы связи калибровочной теории. Для кремния коэффициенты затухания различны для разных решений: $\beta = 1,45$ мкм$^{-1}$, $\gamma = 2,76$ мкм$^{-1}$, $\psi = 1,38$ мкм$^{-1}$. Данные значения являются модельными, так как зависят от условий пластической деформации.

Коэффициенты затухания можно сопоставить с характерной длиной пробега дислокаций l — расстоянием, на котором плотность дислокаций уменьшается в e раз. В рассмотренном случае l постоянно и не зависит от ширины образца. Теоретическое значение $l \sim 1$ мкм для краевых дислокаций получено при величине скалывающего напряжения $\tau_c = 7510^8$ Нм$^{-2}$ и табличных значениях постоянных упругости.

Литература

1. *Kadic A., Edelen D.* A gauge theory of dislocations and disclinations. Berlin: Izd. Springer-Verlag, 1983. 168 с.
2. *Osipov V. A.* A monopole-like solution for static disclinations in continuum media // Phys. Lett. A. 1990. Vol. 146. № 1–2. С. 67–70.

3. *Valsakumar M. C., Sahoo D.* Gauge theory of defects in elastic continuum // Bull Mater. Sci. 1988. Vol. 10. № 1–2. С. 3–44.
4. *Kleinert H.* Gauge theory of time-dependent stresses and defects: quantum defect dynamics // J. Phys. A: Math and Gen. 1986. Vol. 19. № 10. С. 1855–1862.
5. *Мусиенко А. И.* Квантовая калибровочная теория дислокаций // Физическая мысль России. 1996. № 3–4. С. 3–16.
6. *Bogatov N. M.* Gauge field theory of dislocations formation by thermal stresses // Phys. Stat. Sol. (b). 2001. Vol. 228. № 3. С. 651–661.
7. *Шувалов Л. А., Урусовская А. А., Желудев И. С. и др.* Современная кристаллография. Т. 4. Физические свойства кристаллов. М.: Наука, 1981. 496 с.
8. *Панин В. Е.* Волновая природа пластической деформации твердых тел // Изв. вузов. Физика. 1990. Т. 33. № 2. С. 4–18.
9. *Фролов К. В., Панин В. Е., Зуев Л. Б. и др.* Релаксационные волны при пластической деформации // Изв. вузов. Физика. 1990. Т. 33. № 2. С. 19–35.

Статья поступила 11 февраля 2003 г.
Кубанский государственный университет
© Богатов Н. М., Савченко А. П., 2004