第二部分 晶体缺陷

《结晶学》第七章

线缺陷-位错

#### 晶体中、偏离点阵的部位为一维线状

§7.1晶体滑移机构及位错模型的提出

§7.2 柏氏矢量

§7.3 位错的产生、运动及增殖机构

§7.4 位错的应力场和应变能

§7.5 位错与其他缺陷间的相互作用

§7.6 锗硅单晶中的位错

# 本章介绍的线缺陷也称"位错"

这种线缺陷出现时,总是伴随着晶体中一部分原子位置错误的排列而 偏离正常的晶格格点的位置。 §7.1 晶体滑移机构及位错模型的提出

 临界切应力的概念
 应力:物体上某一点处,单位面积 上所受到的作用力。
 某小面积(△S)上,单位面积所受的作

用*つ*:

$$\bar{T}_{\mp ij} = \frac{\Delta F}{\Delta \bar{S}}$$

P点处的应力T为该点处无限小的面积 上,单位面积所受到的作用力:

$$\vec{T} = \lim_{\Delta S \to 0} \frac{\Delta \vec{F}}{\Delta \vec{S}} = \frac{\mathrm{d}\vec{F}}{\mathrm{d}\vec{S}}$$



应为T有方向性,是位置的函数,还 是小面元法线方向n的函数,通常在直角 坐标系下描述某点的应力,可用九个分量 的张量( $t_{xx} t_{xy} t_{xz}, t_{yx} t_{yy} t_{yz}, t_{zx} t_{zy} t_{zz}$ )表示。

将应力T分解为两个分量

(1) 沿小面元 dS 法线方向称作正应力S; (2) 沿小面元 dS 切线方向称作切应力 $\tau_{\circ}$ 



当晶体受到应力作用时,在晶体的某一晶面上开始产生 滑移的切应力的临界值称为临界切应力,记做 T<sub>c</sub>,也称最大 切应力,有时也称为晶体的屈服强度。

晶体的屈服强度是衡量固体材料力学强度的一个重要参量

2、晶体的滑移机构及位错模型的建立
(1) 当切应力<屈服强度,应力解除后晶体复原( <mark>弾性形变</mark> );
(2) 当切应力>屈服强度,应力解除后晶体不复原(范性形变)。
把沿着某个晶面发生范性形变的移动,称作晶体的 <mark>滑移</mark> 。
把这个平面称作滑移面。晶体滑移的方向和大小所确定的向
量称作 <del>消移失量<math>(idn)_b^{\rightarrow})_{o}</math></del> 由于晶体的内部排列规律具有各向
异性,晶体的临界切应力也具有各向异性

例如: 在面心立方结构的晶体中, 滑移总是沿着{111}晶面

#### 上的<110>方向进行的。

滑移面总是一些原子面密度比较大的晶面,滑移方向总是一些原子线密度比较大的方向,而且一般滑移一个原子间距。

在1926年, 前苏联的科学家提出一种晶体滑移模型: 滑移面两侧的原子在切应力作用下同步地平移 如图所示,T是施加于晶体上的切应力,X是在T的作用下晶 格的相对位移。由于滑移面两侧晶格原子排列的周期作用,所 以,结合力或位能都是 X 的周期函数, 克服结合 力的T.也应是X 的周期函 数。近似假定切应力**7**是 位移的正弦函数:  $\tau = \tau_M \sin\left(\frac{2\pi x}{h}\right)$ 



当 X 很小时, 有 sin X = X 则:

$$\tau = \tau_M \left( \frac{2\pi x}{b} \right)$$

式中 $\tau_M$ 应为最大应力,即屈服强度。 由虎克定律 $\tau = G\left(\frac{x}{a}\right)$ , G为切变模量 a 为两层原子面间距。  $\therefore \tau_M = \frac{G}{2\pi} \left(\frac{b}{a}\right)$  (b ≤ a)

 $oldsymbol{\pi}_a = b$ ,此即为估算最大切应力(屈服强度)的理论公式。

$$\tau_{M} = \frac{G}{2\pi}$$

对一般金属材料 $G = 10^{10} \sim 10^{11}$  Pa 则:  $\tau_M = 10^9 \sim 10^{10}$  Pa 但是, 实验测量得:  $\tau_M = 10^6$  Pa

1934年Taylor G.T.等人提出了新的模型:

小滑移首先在滑移面附近很小区域内发生,在滑移区与未滑移区的交界处,有一部分的粒子偏离原来点阵的位置排列(更密或更疏),把这种晶体缺陷称作位错(或位错线)。

2、在应力作用下,通过位错处原子进一步滑移,使位错线逐 渐向前移动,最后,完成滑移一个原子间距。

由于原子的滑移只在位错线附近进行,所需应力比上下层之间同时滑动要小的多。

### 位错的重要特征

位错必然在晶体中构成一个闭合环线或终止于晶体表 面,决不能终止于晶体内部。



### 3、位错的基本类型

根据滑移方向和位错线取向的不同,位错可以划分为

刃型、螺型、混合型位错

(1) 刃型位错(棱位错) 如图7.1.6所示。

滑移方向(用滑移矢量 b 表示),与位错线垂直

正刃型: 半原子平面落于滑移面上方;

负刃型:半原子平面落于滑移面下方。

刃型位错用符号"<u></u>"表示,指向 滑移面一侧的半个原子平面。



刃型位错的运动产 生晶体滑移示意图





滑移矢量为:

**-** *b* 

### (2) 螺型位错

滑移方向(用滑移矢量 b 表示), 与位错线平行

上下层原子的排列成螺旋状。根据螺旋方向的不同, 分为 左螺旋型和右螺旋型。(大拇指指向滑移矢量, 四指由未滑移 区逐渐指向滑移区)







螺型位错的两种运动形式均可以产生晶体滑移



① 在ABCD的平面内运动



② 保持位错线平行,在ABCD面外的曲面上运动

(3)混合型位错

滑移区与未滑移区的交界线与滑移矢量既不平行又不垂 直时,产生混合型位错。





图7.1.12 具有环形位错线的混合型位错

晶体中存在的环形位错线不一定必须由各种类型的位错 构成。例如图7.1.13所示的环形位错线是纯刃型的,形成它 的滑移矢量与位错线是垂直的。



图7.1.13 具有环形位错线的刃型位错

## 7.2 柏氏矢量

滑移矢量的大小等于原子间距的整数倍,其大小可以反 映产生位错的数目或强度,依据其方向与位错线的交角可以 判断位错类型,但用其描述位错的特征尚有不足。

例如





左螺型位错



右螺型位错

◆不同方向的滑移矢量可对应相
同符号的螺型位错;
◆相同方向的滑移矢量可以产生

不同方向的螺型位错。



左螺型位错

1、 柏格斯回路与柏氏矢量

 $\vec{A} \rightarrow \vec{A}$ 在晶体中选三个初基矢量 $\alpha_{n} \beta_{n} \gamma$  (就是晶格基矢量),单 位长度分别为 $\alpha_{n} \beta_{n} \gamma$ ,从晶体中某一点出发,以走一个初 基矢量长度作为一步,沿着初基矢量方向走下去,最后回到 出发点,所走的闭合回路称柏格斯回路。

性质A: 回路内为完整晶格区域, 则:

$$n_{\alpha}\cdot\vec{\alpha}+n_{\beta}\cdot\vec{\beta}+n_{\gamma}\cdot\vec{\gamma}=0$$

性质B: 若回路内有缺陷, 则:

$$n_{\alpha} \cdot \vec{\alpha} + n_{\beta} \cdot \vec{\beta} + n_{\gamma} \cdot \vec{\gamma} = \vec{b}$$



(b为晶体中某一方向原子间距的整数倍)

柏氏回路中,回路沿途矢量的加和,称为柏格斯矢量

为了用柏格斯矢量表示线缺陷,做如下规定:

(1) 位错线方向一般可人为规定; 现设垂直纸面向外为正;

② 按右手系定则,拇指指向位错线方向,弯曲四指指向柏氏回路行走方向(逆时针方向);

③ 在晶体的好区域中,从任一原子出发,绕位错逆时针作 柏氏回路,路径必须是好区域;

④ 闭合柏氏回路中, $\pi_{n_{\alpha}}$ 、 $n_{\beta}$ 、 $n_{\lambda}$  ,再求出柏氏矢量。

例如: 一个刃型位错的伯格斯矢量表示:

$$b = -5\gamma + 5\beta + 5\gamma - 6\beta = -\beta$$



例如一个螺型位错的伯格斯矢量表示:

 $b = -4\gamma + 5\beta + 2\gamma - \alpha + 2\gamma - 5\beta = -\alpha$ 



#### 柏氏矢量的物理意义及位错的普遍定义

◆位错附近,原子处于非正常位置,原子排布规则性被破 坏,相对位置发生畸变。这种畸变在中心位置格外严重, 同时向外分散。

柏氏矢量的物理意义: 围绕位错作柏氏回路时, 把分散的 畸变叠加起来, 总的结果由柏氏矢量表达, 畸变越严重, 柏氏矢量越大。

◆点缺陷也会发生畸变,但它具有对称性,正负相抵消, 柏氏矢量为零。

◆线缺陷的畸变由某一方向滑移造成,不对称, 柏氏矢量 为原子间距的整数倍。柏氏矢量与滑移矢量大小相等, 方向不一定相同。 位错的普遍定义:一个柏格斯回路绕着晶体缺陷 作一闭合回路,其所走步数矢量和不为零,这个晶 体缺陷叫位错。

此前定义"位错是已滑移区与未滑移区的交界线", 略显粗糙。

# 2、柏氏矢量的守恒性

一个确定的位错,其柏氏矢量是固定不变的(与伯格斯回路的大小、路径无关)。而且,它有如下表现:

(1) 方向指向结点的位错线的柏氏矢量之和等于方向离开结点的位错的柏氏矢量之和。



推论:相交于一个结点的各位错,同时指向结点或同时离开 结点时,各位错的柏氏矢量之和为零。 (2) 一条位错线,无论它的形状如何变化,其各处的 柏氏矢量相同。



3、一种常用的确定柏格斯矢量的方法——Frank处理方法 选择一个与被分析晶体在结构上相同的完整晶体作为参 考晶体。首先在待分析的非完整晶体中,绕位错做一个柏格 斯回路,然后在完整的参考晶体中按同样的方式作类似的回 路,把参考晶体中从最后一点到始点的矢量叫作柏格斯矢量。 其过程如图7.2.8(a),(b)所示:



Frank方法求得的柏氏矢量与前述方法方向相反。请做了解!

### 4、柏氏矢量的一种符号表示法

可以借助晶向指数来把每一个柏氏矢量用符号表示:



一般柏氏矢量用
$$\vec{b} = \frac{a}{n} [uvw]$$
符号表示。

其中, [U V W] 表示该矢量的方向晶向指数;

此柏氏矢量在三个晶轴上的投影分别为:  $\begin{bmatrix} a & a & v \\ -u & v & w \\ n & n & n \end{bmatrix}$ 

此柏氏矢量的长度为: 
$$b = \left| \vec{b} \right| = \frac{a}{n} \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$$

显然以上符号针对立方晶系晶体,a为晶格常数。有时也 将a取为1,此柏氏矢量符号为: $\vec{b} = \frac{1}{n}[u v w]$ 

例:如柏氏矢量 
$$\frac{a}{2}$$
 [110] 也可用符号  $\frac{1}{2}$  [110] 表示

### 7.3 位错的产生、运动及增殖机构

7.3.1 机械应力和热应力产生位错的分析

机械应力:挤压、拉伸、切割、研磨...

热 应 力: 温度梯度至热胀冷缩

> 当然有这些应力存在时,也不是一定产生位错,还要看晶体的屈服强度如何。晶体内部已经存在位错时,只用较小的外力就可以推动这些位错移动,原来的位错成为了位错源,位错源引起位错的增殖。有位错源的晶体屈服强度会降低。

▶晶体的屈服强度强烈地依赖于温度的变化。T升高,原子热 运动加剧,晶体的屈服强度下降,容易产生范性形变。

## 看几个实验结果:

① Ge单晶在温度T<500℃, Si单晶在温度T<650℃的条件 下,进行热处理,一般不产生位错;

② 无位错的Si单晶,屈服强度接近理论值。在800~900℃
 温度下进行热处理,施加较大的热应力也不产生位错增殖;

③ Si单晶薄片在室温下, 施加机械应力使之弯曲, r (曲率
 半径)在2m以上, 不发生范性形变。

若晶体内应力超过晶体的屈服强度,将会出现位错。

讨论弯曲应力和温度应力产生的位错密度问题。



单位面积上位错线数(位错密度)为:  $\rho = \frac{位错数}{总面积} = \frac{d\theta}{b} \times \frac{1}{dr\theta} = \frac{1}{rb}$ 

厚度为d, 曲率半径r 的薄片晶体位错密度为:  $\rho = - rb$ 



举例: 硅晶体特征柏氏矢量  $\bar{b} = \frac{a}{2}$ [110], 晶胞常数 a = 5.43 Å

当弯曲半径1m 产生范氏形变时, 位错密度为: 2.6×10<sup>5</sup>/cm<sup>2</sup>
2、径向温度梯度产生位错密度的估算

径向温度梯度,即晶体的中心部位和外部的温度不同。即 沿着任何半径方向存在温度梯度。



中心部位*T*高,晶格膨胀,对外围晶格施加伸张应力, 外围晶格对中心有压缩应力,在此应力作用下,中心部位晶 格和外围晶体之间发生相对滑移,外围产生许多半原子面, 从而减少中心部位的压缩应力和外侧晶格所受的伸张应力, 产生许多刀型位错。





设一个方形晶片,上下存在温度梯度 $\frac{dT}{dr}$ ,并产生若干条 刃型位错。如何计算位错密度?



此晶片的面积为: $L_0d$ 

则此面上的位错密度为:

$$\rho = \frac{n}{L_0 b} = -\frac{\alpha}{b} \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} \qquad (\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} < 0)$$
$$\rho = \frac{\alpha}{b} \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} \qquad (\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} > 0)$$

此即由径向温梯度估算产生位错密度的关系式:

$$\rho = \left| \frac{\alpha}{b} \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r} \right|$$

例题: 某种器件工艺的操作温度是1000℃左右,若要求在该工 艺中由于热应力造成的位错增殖不超过500条/cm<sup>2</sup>,那么在 Si 晶体上存在的径向温度梯度应控制在何值之下?

答: T>800°C时, Si晶体的屈服强度减弱, 在热应力作用下将 发生范性形变, 位错密度为:

$$\rho = \left| \frac{\alpha}{b} \frac{dT}{dr} \right|$$
  
Si的特征相氏矢量  $\vec{b} = \frac{a}{2} [110]$ , 其强度  $|\mathbf{b}| = \frac{\sqrt{2}}{2} a$ ,  
Si的热膨胀系数  $a = 2.33 \times 10^{-6}$ °C, Si的晶格常数  $a = 5.43$  Å,  
则:  $\left| \frac{dT}{dr} \right| = \frac{\rho b}{\alpha} = \frac{500 \times \frac{\sqrt{2}}{2} \times 5.43 \times 10^{-8}}{2.33 \times 10^{-8}} = 8.2^{\circ}C/cm$ 

7.3.2 空位团的崩塌产生位错及位错的攀移运动

晶体中存在过饱和空位, 倾向于在表面能比较低的晶 面凝聚成片状集合体, 片状空位团在应力作用下, 崩塌后 便形成一位错环。这便是称作<mark>棱柱位错</mark>的一种刃型位错环。



#### 位错的攀移

位错若遇到扩散来的空位或间隙原子, 空位或间隙原子 移动至半原子面边缘处, 将导致位错线的移动。

定义: 位错依靠吸收扩散来的空位 或间隙原子, 产生的这种由一个滑 移面向临近的另一个滑移面的运动 称为位错的攀移。



其速度依赖于空位或间隙原子 的浓度和扩散迁移速度,运动比较 图7.3.6 缓慢。当晶体中过饱和空位浓度比较大时,较靠近晶体表面 的位错有可能通过吸收空位而攀移运动到表面而得以消除。

请区别位错的"滑移"与"攀移"

#### 7.3.3 位错的增殖机制

位错的增殖是指在一定的外力作用下,由晶体中已有的 位错不断繁殖出新的位错的过程。

原位错起到产生新位错的位错源的作用。

Frank—Read机制:

(1) L型平面源的情况:一端固定的位错线增殖新位错。如下图:



### (2) U型平面源的情况

两端固定的位错线增殖新位错,形成的环行蜷线如下图:





#### 7.4 位错的应力场和应变能

位错是一种晶格缺陷, 它的存在会使晶格附近的结构发 生扭曲而偏离原来的点阵位置, 因此在无外力的作用下, 其 内部也存在着内应力。

对于一个棱(刃)位错,多余的半原子平面一侧晶格被压缩,另一侧晶格被伸张,在位错附近的区域,不同位置上应 力的大小和性质不同,从而构成应力场。

位错附近的这种应力场和其它缺陷的相互作用, 决定了 位错在晶体中的许多行为。例如: 位错与杂质之间的相互作 用、位错与位错之间的相互作用。 目前主要还只能采用弹性理论的近似的方法,把晶体看作是连续的各向同性的介质来处理。

依据<mark>连续介质模型</mark>建立起来的理论反映的仅是位错周围 远程应力场的情况。

7.4.1 刃型位错的应力场

建立如下连续介质模型: 以02为中心

轴,作一个空心圆柱体,沿X-Z切开半



个晶面,使上半部沿切开的面向圆柱的中心轴推移一个原子 间距 b, O-Z 轴则变成为一根刃型位错线。

Z轴方向没有形变,可只考虑X-Y截面上的应力分布,按 照此模型可计算出X-Y面上任意点P的应力。



在极坐标系下,  $P(r, \theta)$  点的应力:

$$\tau_{rr} = \tau_{\theta\theta} = -D \frac{\sin \theta}{r} ($$
正应力)  $\tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} = D \frac{\cos \theta}{r} ($ 切应力)  
式中  $D = \frac{Gb}{2\pi(1-\gamma)}$  G为切变模量,  $\gamma$ 为柏松比, b 为柏氏矢量

分析:





分析: ①只有切应力, 无正应力, 因此没有拉伸和压缩效应, 晶体体积不变; ② 应力的分布与 r 有关, 沿Z轴对称分布, 随 r 的增大而减弱。

### 7.4.3 位错的应变能

在外力作用下,位错附近发生畸变,产生应力场,在应力 场中贮存的能量称为应变能。应变能的大小反映位错在晶体中 存在的稳定性。因此对应变能进行计算十分必要的。

计算应变能的方法:

<u>外力形成位错时所作的功的大小,即贮存在晶体中的应变能。</u> 例:在一单位长度的晶体上,当有一外力作用到滑移面上时 引起滑移,引起的位移x从()到 b,外力 f(x) 将从 f(0) = 0 增加 到 f(b) = F,按照虎克定律: f(x) = kx(k为弹性常数)晶体在外力 <math>f(x)作用下移动 dx 距离所作的功为: dW=  $f(x)dx = kxdx_o$ 因而形成强度为 b 的位错所作的功为:  $W = \int_0^b kxdx = \frac{1}{2}kb^2$ 

$$\mathcal{R} f(b) = kb = F$$
,  $\mathcal{M} W = \frac{1}{2}kb^2 = \frac{1}{2}Fb$ 

现在求F(球坐标系):

对于刃型位错,在滑移面上 $\theta=0$ ,  $\cos\theta=1$ ,

$$\tau_{\rm rr} = \tau_{\theta\theta} = -D \cdot \frac{\sin \theta}{r} = 0$$
 (此时正应力不做功)

作用到从 $r_0$ 到 $r_1$ 的全部滑移面上的外力

$$F = \int_{r_0}^{r_1} \tau_{r\theta} dr = \int_{r_0}^{r_1} \frac{Gb}{2\pi(1-\gamma)} \cdot \frac{1}{r} \cos\theta dr$$
  
=  $\frac{Gb}{2\pi(1-\gamma)} \int_{r_0}^{r_1} \frac{1}{r} \cos\theta dr$   
=  $\frac{Gb}{2\pi(1-\gamma)} \ln \frac{r_1}{r_0}$ 

v

可以求出形成刃型位错,外力所做的功:

$$W = \frac{1}{2}Fb = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\gamma)} \cdot \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right)$$

即位单位长度刃型位错的应变能。

对于螺位错,作用从 I<sub>0</sub> 到I<sub>1</sub>的全部滑移面上的外力为:

$$F = \int_{r_0}^{r_1} \tau_{g_z} dr = \int_{r_0}^{r_1} \frac{Gb}{2\pi r} dr = \frac{Gb}{2\pi} \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right)$$

单位长度螺位错的应变能 (形成螺位错的外力所做的功):

$$W = \frac{1}{2}Fb = \frac{Gb^2}{4\pi} \cdot \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right)$$

刃位错应变能 
$$W = \frac{1}{2}Fb = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\gamma)} \cdot \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right)$$
  
螺位错应变能 
$$W = \frac{1}{2}Fb = \frac{Gb^2}{4\pi} \cdot \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right)$$

显然,柏氏矢量强度小,其应变能也较小,就相对稳定。 这就是为什么柏氏矢量通常位于原子线密度最大的方向。 一个位错强度为2b 的位错,与2个强度为b 的位错相比, 显然后者应变能更小。

这就是为什么位错的柏氏矢量通常是一个原子间距。

应变能越低越稳定。应变能高的位错倾向于通过适当的位 错反应分解为多个能量较低的位错。

刃位错应变能 
$$W = \frac{1}{2}Fb = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\gamma)} \cdot \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right)$$
  
螺位错应变能  $W = \frac{1}{2}Fb = \frac{Gb^2}{4\pi} \cdot \ln\left(\frac{r_1}{r_0}\right)$   $W \propto b^2$ 

应变能:

位错*nb>n*个位错b的应变能之和>没有位错的晶体 注意,从应变能的表达式来看,若r<sub>1</sub>→∞或r<sub>0</sub>→0, W→∞实 际情况不能符合。这是否说明应变能无穷大吗?

由于在位错中心区 $(r \rightarrow 0)$ 不能用连续弹性介质模型来计算, 而 $r_1$ 也不能超过晶体中嵌块的大小, $r_1 \approx 10^{-4} \text{cm}_{\circ}$ 

因此任何数学模型的假设条件都十分重要。

7.5位错与其它缺陷间的相互作用【多个(种)缺陷的复杂情况】

位错在晶体中并不是孤立的,位错与位错之间,位错与 其它缺陷之间有着复杂的相互作用,结果产生许多位错组态 及缺陷组态。

7.5.1 位错与杂质原子的相互作用 设晶体中有一个正刃型位错
(1) 位错上方: 晶格原子受压缩应力作用
(2)位错下方:

晶格原子受伸张应力作用



在一个完美晶体中,引入一个替代式杂质缺陷,因为晶 格周期性,此点缺陷出现在各晶格点的几率应该是一样的。 现在考虑有正韧性位错的晶体中,一个替代式杂质缺陷 请问此点缺陷在位错周围各点出现的难易程度。

若用半径大的原子替代基体原子, 在周围产生压缩应力。若用半径小的原子替代基体原子, 在周围产生伸张应力。

半径较大的替代式杂质出现在正位错上 方时会增加压缩应变,提高应变能,出现下 方时会降低应变能。反之……

因此位错上方, 倾向于排斥半径大的替位杂质, 吸收半径小的替位杂质。反之.....



如下图所示,通过科垂尔(Cottrell)连续介质模型近似处 理得到的棱位错的应力场对替位式杂质的交互作用能为:

$$U = \frac{4(1+\gamma)}{3(1-\gamma)} \cdot \frac{Gb\varepsilon r^3 \sin \alpha}{R} \qquad \qquad \varepsilon = \frac{r^2 - r}{r}$$

式中r<sup>'</sup> 为杂质原子半径, r 为 基体原子半径, (R, α)为杂质 原子极坐标, γ 为泊松比(小于 1), G 为切变模量, b 为柏氏 矢量。



1



作功,降低了体系内能;相对稳定。这样:

r' > r时,  $\varepsilon > 0$ : 在 $0 < \alpha < \pi$ 处, U > 0, 在 $\pi < \alpha < 2\pi$ 处, U < 0大个杂质 在位错下方 相对稳定

 r' < r时,  $\mathcal{E} < 0$ : 在 $0 < \alpha < \pi$ 处, U < 0, 在 $\pi < \alpha < 2\pi$ 处, U > 0 

 小个杂质
 在位错上方 相对稳定

位错和杂质原子依靠相互作用,可以彼此降低应变 能,缓和内应力。因此位错附近常吸有大量的替代式杂质 原子,称为<mark>科垂尔气团</mark>。在平衡状态,位错附近的杂质原 子的浓度按玻尔兹曼分布律:

$$C = C_0 \exp(-U/kT)$$

C<sub>0</sub>为晶格中杂质原子的平均浓度, *k*为玻尔兹曼常数, T为绝对温度, *U*为位错与杂质的交互作用能。

利用这一效应,Si、Ge 中加入 Cu、Li 杂质,高温下,使 杂质向位错附近扩散,冷却后 Cu、Li 在位错附近沉积出来, 利用 X射线形貌照像法或红外显微镜可观察被缀饰的缺陷。 ★位错中心处,对替代式杂质如何作用? 上述模型不适于位错中心的情况。当 R = (1)时,  $U \rightarrow \infty$ 不符合实际情况。在位错 中心不仅要考虑弹性交互作用,还要考虑 化学键的作用问题。例如,在刃型位错线 上存在不饱和的价键,他们倾向于和附近 的杂质原子发生作用,彼此降低能量。如 图7.5.2 所示 ★刃位错对间隙式杂质如何作用?

间隙式杂质倾向于使晶格膨胀。它与刃 型位错的相互作用与"大块头"替位式杂质类 似。倾向于吸收在刃型位错的下部伸张区。 称斯诺克气团。



图7.5.2 位错线上 的悬挂键及其与杂 质原子的相互作

刃型位错周围存在的杂质气团会使位错的运动变得困难,称**钉** <u>扎效应</u>。钉扎效应会使晶体材料不易于滑移,柔韧性变差,因 而变硬变脆。

★螺位错对替代式杂质如何作用?



螺位错没有正应力,而且杂质原子在面心立方晶体中形成的应力场接近于球形对称,因此杂质原子与螺位错之间没有明显的弹性交互作用;

# 7.5.2 位错与空位、间隙原子等点缺陷间的相互作用



请大家想想看?

一般可以分为两种情况:

空位、间隙原子可以产生位错或使原来位错发生攀移。
 这时,位错成了点缺陷的黑洞

(2) 位错通过运动或相互作用可能产生空位、间隙原子;这时, 位错成了点缺陷的源泉

(1) 位错作为点缺陷的黑洞

空位可看作是半径趋于零的替位式杂质, 吸附到了位错的 受压缩区, 被吸附到位错中心的空位或间隙原子不形成科垂尔 气团, 而是消失在位错中, 或引起位错攀移。

当晶体中缺少能吸除过饱和空位的位错时,大量的过饱和 空位也能凝聚成片状的空位团,他们的崩塌便能产生棱柱位错 环。



当晶体遭受高能粒子的辐射时,会产生大量的非平衡状态的间隙原子,他们在晶体中能凝聚成片状原子层,形成**另**一种形式的棱柱位错环。



(2)位错作为点缺陷的源泉

一般情况下, 空位等点缺陷浓度总是高于平衡 浓度, 它们扩散到位错处消除, 从而位错线经常成 为消除点缺陷的漏洞;

仅在特殊情况下,基体中的空位或间隙原子出 现低于平衡浓度的现象,这时位错的半原子平面出 现相反方向的攀移运动。从而,向外"发射"空位或间 隙原子。这时位错线会成为产生点缺陷的源泉。 另外,位错和位错之间在外力作用下作滑移运 动并产生相互作用,这时它们可能成为产生点缺陷 的源泉。





## 7.5.3 位错的交割与割阶

在滑移面上运动的位错会与其它位错线产生相互切割的 过程,称作位错的交割。一位错与另一位错交割后产生扭折 的线段,称位错的割阶。情况很多,下面仅举二例:

(1) 位错线相互垂直(且柏氏矢量也垂直)刃型位错的交割



(2) 一个刃型位错和一个螺位错相交割



设右螺型位错BB<sup>'</sup>不动,其右方的一个正韧型位错AA<sup>'</sup> 向左滑移。位错交割后,则在刃型位错AA<sup>'</sup>上形成大小与b<sub>2</sub> 相同的割阶MM<sup>'</sup>;同样,交割后,在螺型位错BB<sup>'</sup>上也会 形成大小与b<sub>1</sub>相同的一段折线NN<sup>'</sup>,且NN<sup>'</sup>垂直于b<sub>2</sub>,因 此NN<sup>'</sup> 为一段刃型位错。

#### 7.5.4 位错间的弹性交互作用

每个位错在它周围都有一个应力场。当两个位错彼此靠 近时,相互间将产生力的作用,这种作用力决定了晶体中位 错的排列组态。例如位错排、小角晶界、多边形化等。

(1)作用到位错线上的力

如下图所示: 边长为L的正方形, 在切应力T的作用下, 一位错从一边进入, 从另一边穿出。



滑移面相对位移为b,切应力作功  $W=fb=\tau A b=\tau L^2 b$ 

单位长度位错线受力为F,F与位错线垂直,长度为L的 位错移动L距离,则外力做功为 $W = (FL) L = FL^2$ 

比较上面的两个式子则: F=Tb

此即在切应力T的作用下,在柏氏矢量为b的单位长度 位错线上所受的垂直方向的作用力。

对于刃位错:位错线上受力F的方向与切应力T方向一致; 对于螺位错:位错线上受力F的方向与切应力T方向垂直。



(2)两个相互平行的刃型位错间的作用力

在切应力了作用下,在柏氏矢量为b的单位长度位错线上 所受的垂直方向的力

 $F = \tau b$ 

如图所示:

位错②受位错①的作用,作用力 为 $F_o$  但位错②只能在滑移面上运<sup>T</sup> 动,因此只考虑F沿着OX 方向的 分 $DF_x$ :



$$F_{x} = \tau_{yx}b_{2} = \frac{Gb_{1}b_{2}}{2\pi(1-\nu)}\frac{x(x^{2}-y^{2})}{(x^{2}+y^{2})^{2}} = \frac{Gb_{1}b_{2}}{2\pi(1-\nu)y} \cdot \frac{\frac{x}{y}\left[\left(\frac{x}{y}\right)^{2}-1\right]}{\left[\left(\frac{x}{y}\right)^{2}-1\right]^{2}}$$
也可以变换为极坐标:

$$F_{x} = \frac{Gb_{1}b_{2}}{2\pi(1-r)} \cdot \frac{\cos\theta \cdot \cos 2\theta}{r}$$

当 $F_x > 0$ 时, $F_x$ 指向X轴正方向,对2是斥力,位错远离;

当 $F_x < 0$ 时, $F_x$ 指向X轴负方 向,对2是引力,位错靠近。





# **【** 符号相同的位错



1、2是同型位错, *b*<sub>1</sub>*b*<sub>2</sub> > 0 当x < y时,  $\theta > \frac{\pi}{\Lambda}$ , 则 $F_x < 0$ , 为引力 当x > y时,  $\theta < \frac{\pi}{4}$ , 则 $F_x > 0$ , 为斥力 当x=y时,  $\theta=\frac{\pi}{4}$ , 则 $F_x=0$ , 不稳定平衡状态 当x=0时,  $\theta=\frac{\pi}{2}$ , 则 $F_x=0$ , 稳定平衡状态



结论: 位于相互平行的不同滑移面上的同型号棱位错, 当它们处于*x*=0的位置时,即沿Y轴排列时,是力学 上的稳定位置。 当晶体中沿相互平行的滑移面上同时存在许多同型号刃 型位错时,它们相互作用,结果是比较靠近的位错相互吸 引,沿Y轴方向排成一列。而距离较远的位错相互排斥,在较 远处形成另一列位错。这样在一列同型号刃型位错的两侧晶 格,晶格方向会相差一个小角度q,称为小角晶界。



发生范性形变的金属会出现多边化现象。由于弯曲形 变,晶体中产生许多同号棱位错,向稳定的位错组态变 化,最后形成若干条小角晶界,在外形上呈现多边化,称 作**多边化现象**。

在多边化过程中,可能同时存在位错的滑移和攀移两 种形式的运动。



有时, 一系列的同型号位错产生于同一滑移面上, 它们 之间恒为斥力, 距离越远, 斥力越小。

$$Fx = \frac{Gb_1b_2}{2\pi(1-r)} \cdot \frac{1}{x}$$



(3)两个相互平行的螺形位错间的相互作用力

如图所示:两个相互平行的且平行于Z的螺位错线在X-Y平面内的坐标分别为O(0,0), P(x, y),其柏氏矢量分别为 $b_1$ 和 $b_2$ 。在原点O位置的位错的应力场作用于P(x, y)点的切应力 为:  $\tau_{\theta z} = \frac{Gb_1}{2\pi r}$ 

在其作用下,*P*点的位错线 上所受作用力大小为:

$$F = \tau_{\theta z} b_2 = \frac{G b_1 b_2}{2\pi r}$$

$$F \perp au_{eta}, \ F$$
与 $r$ 的方向一致 $_{\circ}$ 



 $F = \tau_{\theta_z} b_2 = \frac{G b_1 b_2}{2\pi r}$ 

(1) 两位错同型号、b<sub>1</sub>b<sub>2</sub> > 0, F > 0, 表示为斥
カ、且*1*越小、F越大。

同号的两个螺位错相互排斥,倾向于远离。

② 两位错异型号, b<sub>1</sub>b<sub>2</sub><0 , F<0, 表示为引</li>
カ, 且r越小, F越大。

异型号的两个螺位错相互吸引。当彼此接近时,两者重叠在一起时,即复合湮灭。

# 7.6 锗、硅单晶中的位错

前面讨论的位错模型,均建立在简单立方格子结构上,实际晶体中的位错形态要比所讨论的复杂。

7.6.1 金刚石型晶体的几种典型位错

(1) 由位错的应变能  $\propto b^2$ 可知:

▶ 晶体中能稳定存在的位错只能是那些b最小的位错;

 柏氏矢量b较大的位错不易产生,即使产生了也要分解转化 为柏氏矢量小的位错;

▶ 柏氏矢量b最小,表示滑移只能沿那些原子线密度最大的方向发生。

金刚石型晶体结构中(金刚石晶胞):

原子线密度最大方向为<110>,最短的柏氏矢量 $\frac{a}{2}$ <110>,</br><110>晶向族共有12个晶向,因此12个柏氏矢量为特征柏氏矢量:

 $\frac{a}{2}[110], \quad \frac{a}{2}[101], \quad \frac{a}{2}[011], \quad \frac{a}{2}[\overline{110}], \quad \frac{a}{2}[\overline{101}], \quad \frac{a}{2}[\overline{101}]$  $\frac{a}{2}[10\overline{1}], \quad \frac{a}{2}[0\overline{11}], \quad \frac{a}{2}[0\overline{11}], \quad \frac{a}{2}[\overline{110}], \quad \frac{a}{2}[\overline{101}], \quad \frac{a}{2}[0\overline{11}]$ 

含有<110>方向的晶面有许多,它们是以<110>为晶带轴 的一系列晶面。滑移面应是那些晶面间结合力最弱的晶面。而 金刚石型晶体结构中{111}复合面原子面间距最大,价键密度 最低,面与面之间结合力最弱,因此<mark>特征滑移面</mark>应为{111}。

# (2)汤姆孙记号(请大家自学)







 $\begin{array}{c} & & & \\ & &$ 

7.6.1汤姆孙记号的图示

# (3) 几种特征位错型

在晶体的特征滑移面上沿特征滑移方向的滑移最容易发 生,由此产生的位错也称特征位错。

锗、硅晶体的(111)面上 有部分区域的原子沿[10]方 向产生滑移。在滑移区与未 滑移区的交界上产生一个位 错环。不同部位上位错线与 [121] 柏氏矢量的夹角不同、分别 **为**90°位错(刃型位错), 60° 位错, 30°位错及0°位错(螺 位错)等不同类型的特征位错。



7.6.2 锗、硅晶体中的特征位错





7.6.4 60°位错(刃型)





图7.6.6 30°位错(混合型)



7.6.7 枝位镨



7.6.8 棱位错



7.6.2 位错对半导体材料性能的影响

> 位错对载流子浓度的影响

> 位错对迁移率的影响

> 位错对载流子寿命的影响

▶ 位错对材料扩散及腐蚀性能的影响

### (1) 位错对载流子浓度的影响

1 型半导体材料, 棱位错的悬挂键可以接受电子成为满 壳层结构, 起受主作用; 螺位错却没有这种作用。

p型半导体材料, 棱位错的悬挂键可以释放电子, 起施 主作用。

例: Si中60° 核位错, 是挂键密度为1.41/a, 即2.6×10<sup>7</sup>个/cm, 拉制单晶时, Si中位错密度在10<sup>4</sup>条/cm<sup>2</sup>。

所以受主浓度在10<sup>11</sup>个/cm<sup>3</sup>以下,与掺杂的杂质含量比 很小。所以位错对半导体载流子的影响在一般情况下是不显 著的,但对于高纯的N(P)型材料会产生一定的补偿作用。

#### (2) 位错对迁移率的影响

N型半导体材料, 棱位错是一串受主, 接受电子后形成一串负电中心。由于库仑力的作用, 位错线周围形成一个圆柱形的正空间电荷区, 它对运动的电子起散射作用, 使迁移率降低。 而平行于空间电荷圆柱运动的电子, 几乎不受它们的影响。

载流子迁移率

迁移率是指载流子(电子和空穴)在单位电场作用下的 平均漂移速度,即载流子在电场作用下运动速度快慢的量 度,运动得越快,迁移率越大;运动得慢,迁移率小。同一 种半导体材料中,载流子类型不同,迁移率不同,一般是电 子的迁移率高于空穴。

### (3) 位错对载流子寿命的影响

位错对少数载流子的寿命有显著的影响, 在位错密度比 较高的半导体材料中, 寿命7与位错密度成反比。

原因有二:

 ① 位错使晶格发生畸变,或伸张或压缩,从而使禁带宽度 发生变化。在晶格的伸张区,禁带宽度减小,在晶格的收缩
区,禁带宽度变大。电子处于导带低,空穴处于价带顶,两



(2) 受主能级可能起到复合中心的作用。它先从导带和满带 捕获电子和空穴,使其复合掉,从而降低少数载流子寿命。

但是,对于位错密度比较低的半导体材料,测量结果表明随着位错的增多,少子寿命反而上升,这一现象人们认为是由 于位错吸收了晶体中的起复合中心作用的杂质而引起的。 (4)位错对材料扩散及腐蚀性能的影响

 ① 位错周围有应力场,吸附各类杂质,杂质沿位错线的 扩散速度大大高于完整部位。在器件生产工艺中,扩散结不 平整,引起漏电、击穿、噪音、短路等弊病。

(2) 位错部位贮存较高的应变能以及是挂键和扭转键的存 在等原因都使位错部位化学活泼性增高, 腐蚀时易产生蚀坑。

#### 总 结

上述分析说明位错对半导体材料性能的影响是多 方面的,特别是棱位错显得有更大的活泼性。 位错对晶体材料性能的影响规律常因位错同晶 体内存在的其它类型的缺陷(如:杂质原子)间发 生复杂的相互作用而发生变化。

对位错的影响问题要作具体的全面的分析和认识。

## 本章小结

1、晶体的滑移机构和位错模型;

2、位错的基本类型及其特点;

#### 3、关于柏矢矢量;

4、位错的产生、运动和增殖;

5、位错的应力场和应变能;

6、位错与其它缺陷的相互作用杂质原子; 空位/自间隙原子; 位错(交割与割阶);

- 7、位错间的弹性交互作用;
- 8、Si、Ge晶体中的典型位错;
- 9、位错对半导体材料性能的影响 $_{\circ}$