第二部分 晶体缺陷

《结晶学》第八章

面缺陷

晶体中偏离点阵的部位为二维面状

- §8.1 堆垛层错及不完全位错
- §8.2 晶界
- §8.3 相界

8.1 堆垛层错及不全位错

8.1.1 堆垛层错

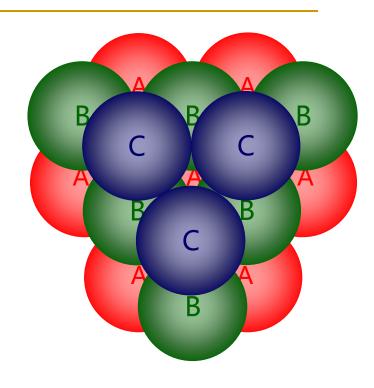
许多金属晶体可看作两种密堆积结构

① 六方结构密堆积 (六方密堆积):

ABABAB, 即: △▽△▽△

② 四方结构密堆积(立方面心密堆积):

ABCABC, 即: △△△△



Frank 符号: △ 表示AB、BC、CA; ▽ 表示BA、CB、AC

若堆垛次序发生了错误,我们称作堆垛层错(层错):

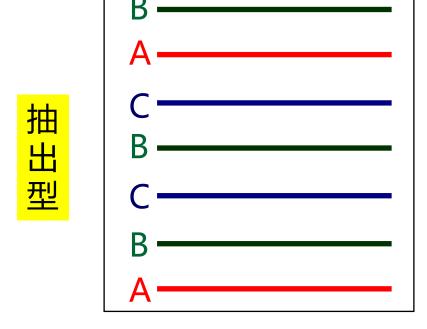
例如: 六方密堆积晶体层错: △▽△△△▽

四方密堆积晶体层错: △△▽△△△

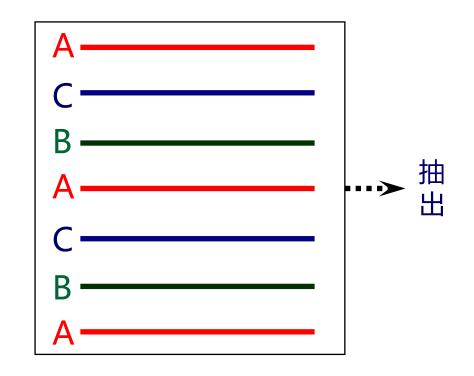
面心立方结构中产生的层错可以分为两种基本类型:

抽出型(本征型): 在正常层序中抽出一层;

插入型(非本征型):在正常层序中插入一层。



 $\triangle \triangle \triangle \triangle \triangle \triangle$



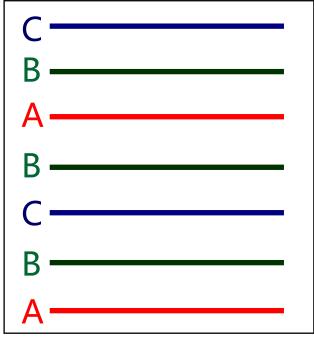
抽出一层(A) = 插入两层 (BC) = 部分△滑移

面心立方结构中产生的层错可以分为两种基本类型:

抽出型(本征型): 在正常层序中抽出一层;

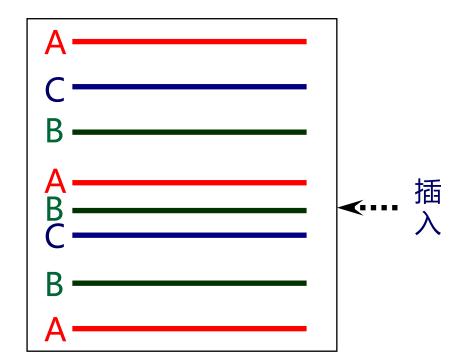
插入型(非本征型):在正常层序中插入一层。

插入型



 $\triangle \triangle \triangle \nabla \nabla \triangle \triangle$

插入一层(B) = 抽出两层 (AC)



对于面心立方结构的金属:

不锈钢及a-黄铜:可以看到大量的层错

铝:几乎观察不到层错

Au、Ag、Cu等贵金属:介于以上两者之间

- ◆ 可以利用层错能的高低来考虑层错出现几率问题;
- ◆ 层错能高,则出现的可能性小,层错能低则出现的可能性大;
- ◆ 堆垛层错不会产生晶格弹性畸变,所以人们认为层错能的主要来源于电子能,它数量级为 *n*×10⁻⁶ J/cm²;
 - ◆以下的讨论都针对面心立方结构的半导体材料
 - ◆ 锗、硅、砷化镓等金刚石结构或闪锌矿结构,由于由两组面心立方格子构成,因此所产生的堆垛层错将比上述模型更复杂

8.1.2 不全位错

不全位错产生的过程:

面心立方晶体中可能产生两种形式的堆垛位错。就产生方式看,可以在(111)面上,将上下两半晶体作相对滑移,抽去一层或插入一层。

如果滑移中止于晶体内部某处,或者抽去的不是完整一层,或者插入也不是完整一层,这时造成的堆垛层错只是在晶体中的一部分区域存在,在堆垛层错部分与完整部分的交界地方就造成了不全位错。即层错的周界就是不全位错。

棱位错与不完全位错!

6

面心立方密堆积结构的晶体中三种不完全位错类型:

肖克莱位错: 堆垛层内部分滑移, 滑移矢量 $\vec{b} = \frac{a}{c} < 112 >$

可以产生纯刃、纯螺、混合型位错

这样的位错可以滑移不能攀移

负弗兰克位错: 抽出B,
$$\vec{b} = \frac{a}{3} < 111 >$$
只产生刃型位错 正弗兰克位错: 插入C,

这样的刃型位错,可以攀移却不能滑移。

肖克莱位错: 堆垛层内部分滑移, 滑移矢量 $\vec{b} = \frac{a}{6} < 112 >$ 可以产生纯刃、纯螺、混合型位错。 这样的位错可以滑移不能攀移

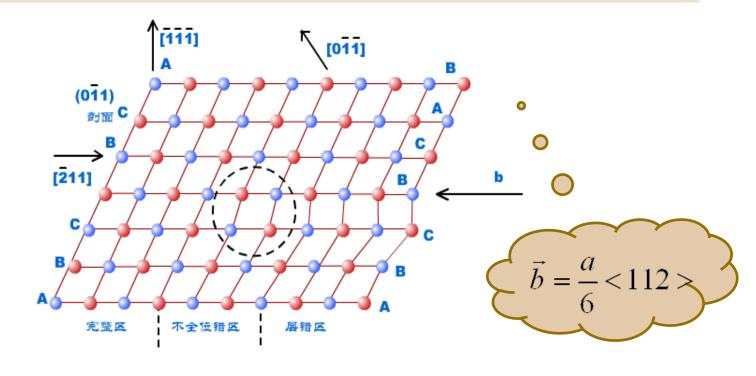


图8.1.2 肖克莱位错

负的弗兰克位错:抽出B,柏氏矢量

$$\underset{b}{\rightarrow} = \frac{1}{3} < 111 >$$

只能产生刃型位错,这样的位错可以攀移不能滑移

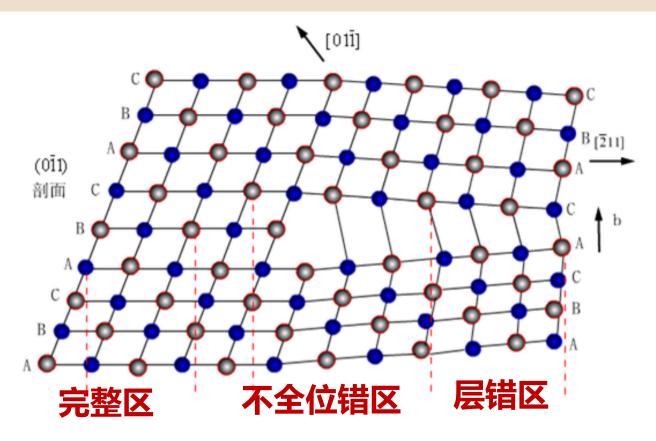


图8.1.3 负弗兰克位错

正的弗兰克位错:插入C,柏氏矢量,

$$\underset{b}{\rightarrow} = \frac{1}{3} < 111 >$$

只能产生刃型位错,这样的位错可以攀移不能滑移。

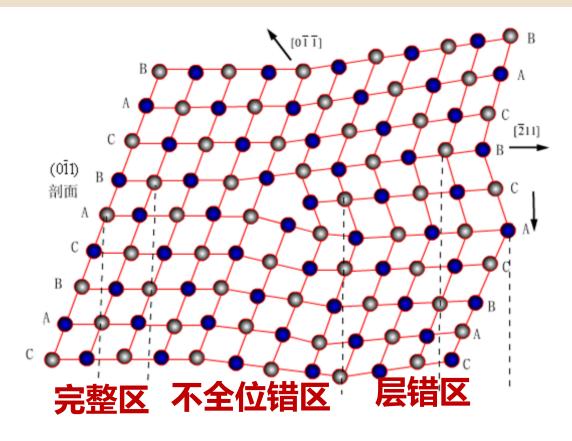


图8.1.4 正弗兰克位错

全位错与不全位错的区别:

全位错: 位错的滑移矢量长度等于一个原子间距

不全位错: 位错的滑移矢量长度小于一个原子间距

晶格畸变程度: 层错 < 不全位错 < 全位错

层错的最近邻关系没有发生变化,只是次近邻关系发生了变化,层错部位几乎不产生弹性形变。

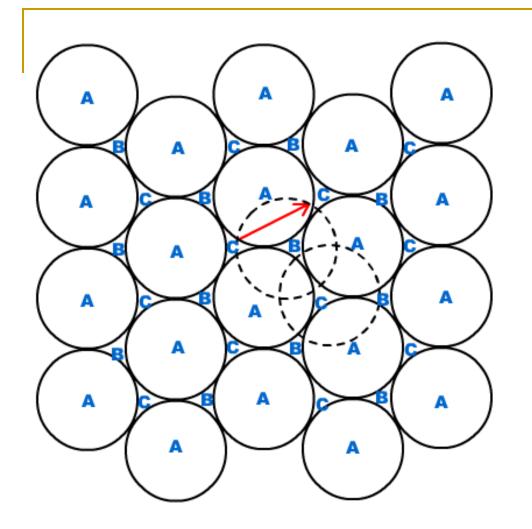
面心立方结构! 如何理解?

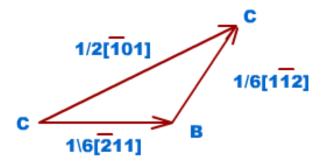
8.1.3 扩展位错:

由于位错能正比于柏氏矢量的平方,因此,柏氏矢量大的位错不稳定,倾向于分解为柏氏矢量较低的位错。在面心立方结构晶体中,处于 $\{111\}$ 面上的 $\vec{b} = \frac{1}{2} < 110 > 型位错是能量最低的全位错,从降低能量的角度来看,尚有可能分解为两个不全位错:$

$$\frac{a}{2}[110] \to \frac{a}{6}[121] + \frac{a}{6}[211]$$

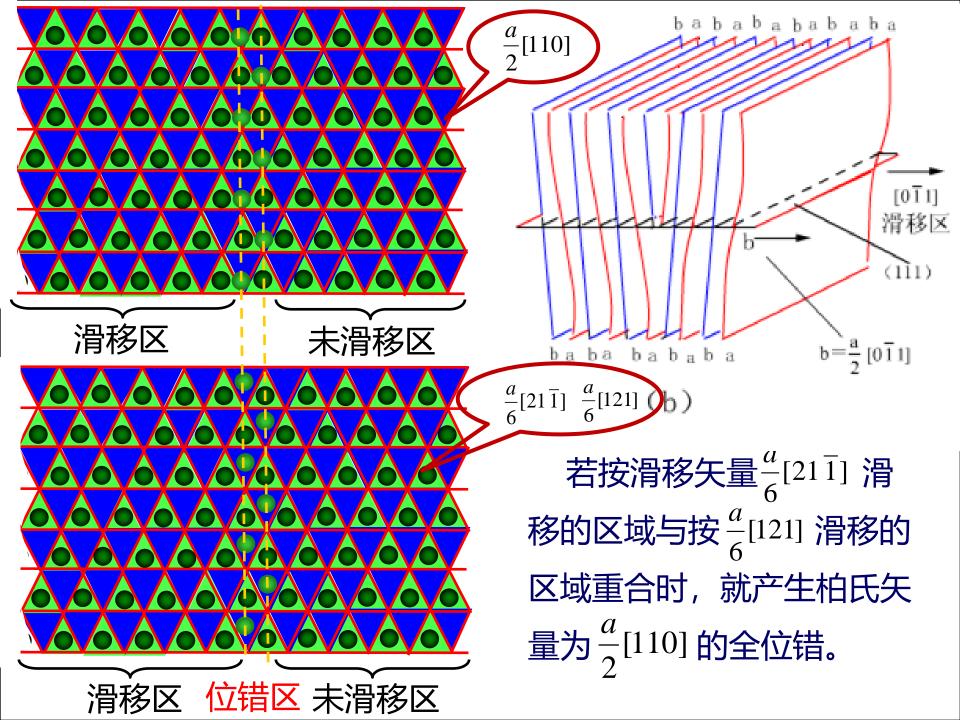
分解后的两个相平行的不全位错相斥,倾向分开,在分开的**两个不全位错之间就产生了一片层错**。平衡时,层错的表面张力和不全位错间的斥力相等。这样形式的位错称为扩展位错。

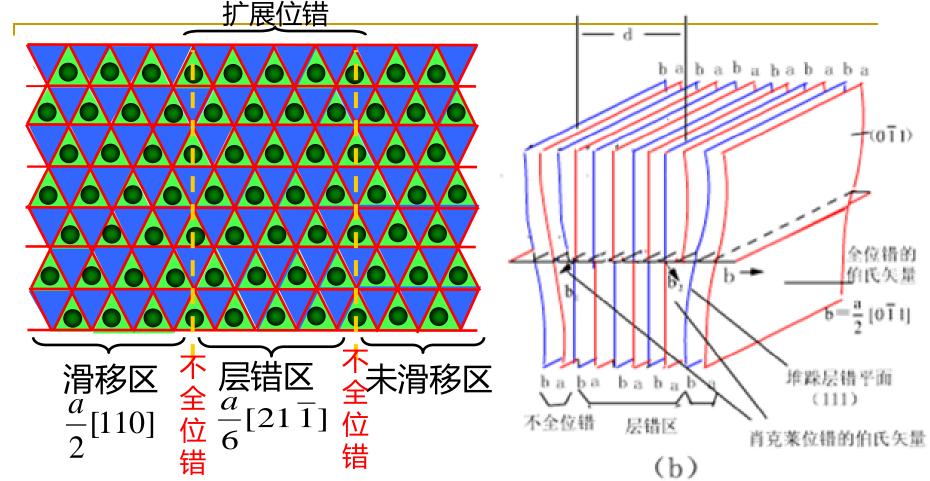




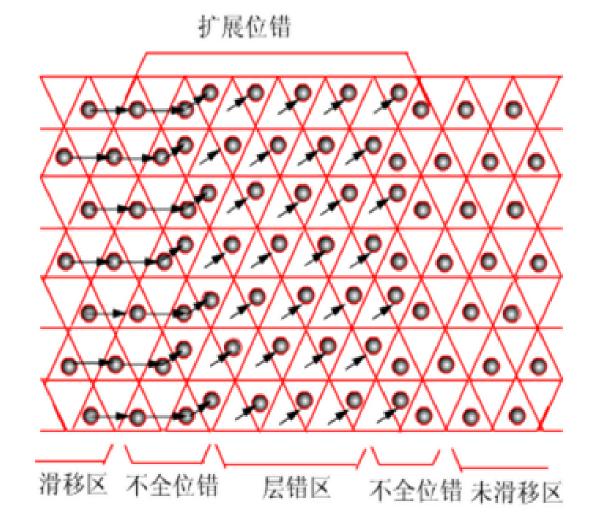
面心立方晶胞 特征柏氏矢量

图8.1.5 面心立方晶体中的密排面





若按滑移矢量 $\frac{a}{6}$ [21 $\overline{1}$] 滑移的区域与按 $\frac{a}{6}$ [121] 滑移的区域不重合时,就产生柏氏矢量分别为 $\frac{a}{6}$ [21 $\overline{1}$] 、 $\frac{a}{6}$ [121] 两条的不全位错。夹在他们之间的区域为层错区。这种形式的两条不全位错称作扩展位错。



扩展位错滑移面上的原子分布

8.1.4 金刚石结构 堆垛层错及不全位错的原子排布特点

金刚石结构可以看作是由两套面心立方子格子套构而成,正常的堆垛次序为AA´、BB´、CC´、AA´……

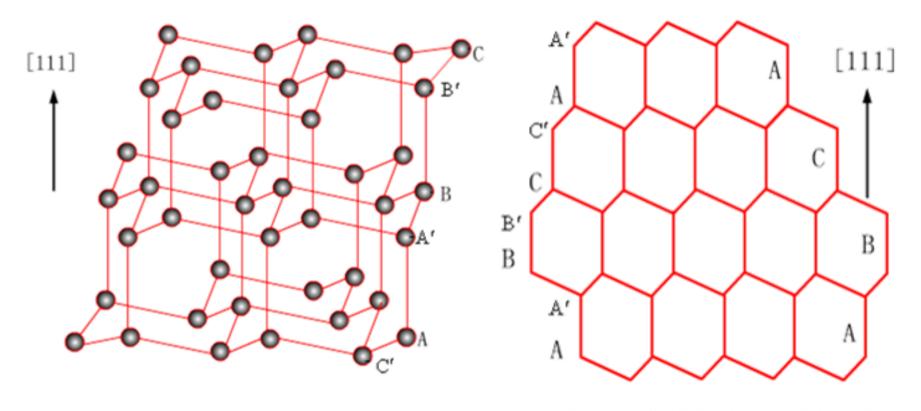


图8.1.8 金刚石结构的正常堆垛顺序

图8.1.9 正常堆垛顺序在(110)面上的投影

金刚石型结构中的本征型和非本征型的层错:

注意:

图中的A, B, C代表的实 际上是A-A'、B-B'、C-C'二 层原子平面层错区与完整区 的交界处, 其不全位错部位 的原子排列情况更为复杂, 而且可能有多种型式如图 8.1.12和8.1.13所示。

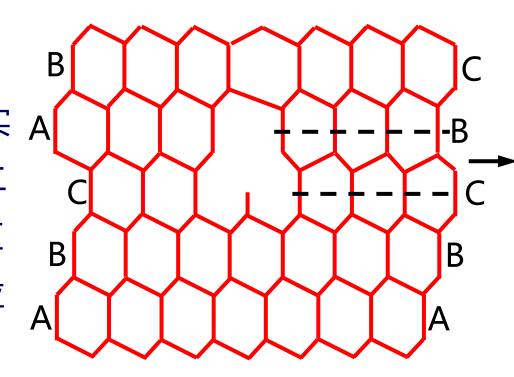


图8.1.10 滑移方式产生的本征层错的原子排列

$$\vec{b} = \frac{a}{6} < 112 >$$

金刚石型结构中的本征型和非本征型的层错:

注意:

图中的A, B, C代表的实 际上是A-A'、B-B'、C-C'二 层原子平面层错区与完整区 的交界处, 其不全位错部位 的原子排列情况更为复杂, 而且可能有多种型式如图 8.1.12和8.1.13所示

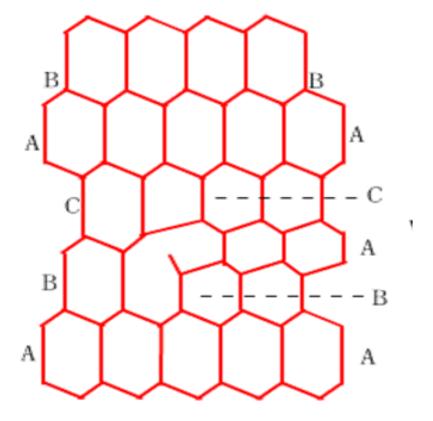
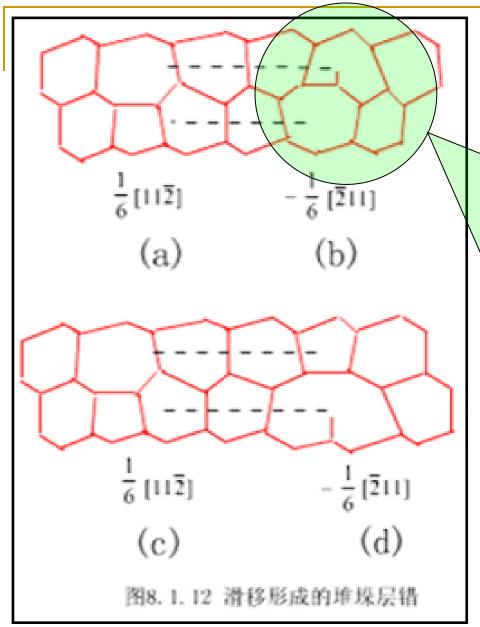
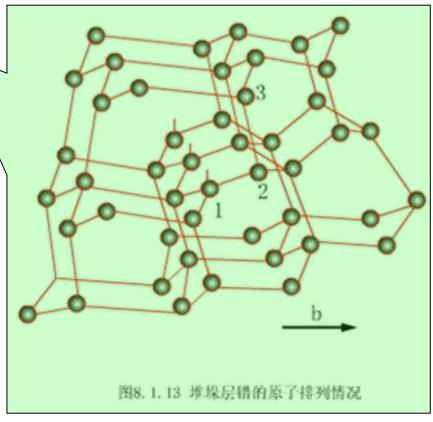


图8.1.11为插入原子面方式产生的非本征型层错的原子排列

$$\vec{b} = \frac{a}{3} < 111 >$$





金刚石结构中的片状空位团崩塌过程的分析:

金刚石结构中可能产生两种类型的片状空位团,见图8.1.14所示,一种是AB型,较易产生,实际上是抽去一部分{111}复合晶面。另一种是BB型,较难产生,会出现大量悬挂键。而容易产生的AB型片状空位团,

若使这种空位团崩塌,上下原子 间的不饱和键的空间位置关系决 定其难以形成稳定的共价键。从A' 能量角度看不容易崩塌,在硅晶 A 体中通过空位团的崩塌产生堆垛 层错的几率很小。空位团更倾向 与杂质等点缺陷复合产生各种类 型的缺陷缔合体或微缺陷等。

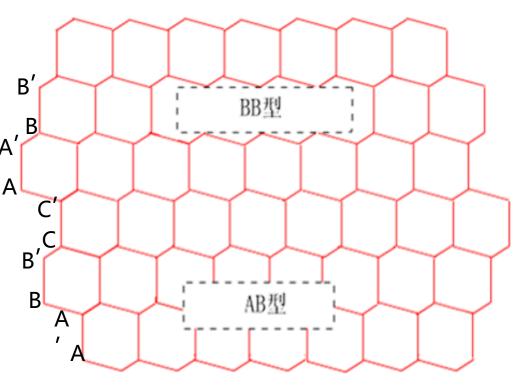


图8.1.14 金刚石型结构的两种片状空位团模型

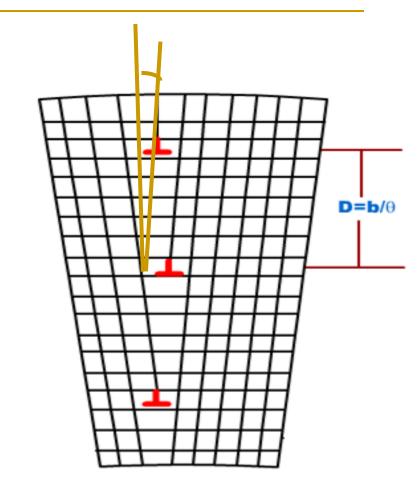
8.2 晶界

8.2.1 小角晶界的位错模型

由于位错间的弹性交互作用,同型号位错倾向于在x = 0处沿Y方向排成一列。此列位错两侧的晶格取向将会出现一个角的偏差 θ ,(通常 θ <10°)就称为小角晶界。

右图表示两个简单立方晶系晶体以 (100)面为交界面构成的小角晶界。两晶体取向差为 θ ,交界面两侧的晶体是对称配置的,称为对称倾斜晶界。有简单关系:

D为位错间距离; b为柏氏矢量



$$D = \frac{b}{\theta}$$

如果交界面是任意的(h k 0)晶面,称为非对称的倾斜晶界。

这种晶界可由柏氏矢量分别为 b_1 = [100]和 b_2 = [010] 的两组平行的刃型位错来表示。

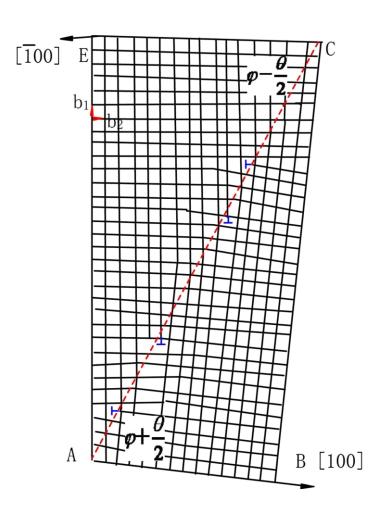
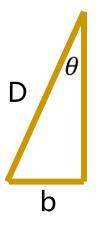


图8.2.2 非对称的倾斜晶界

另外由两组 正交的螺型位 错线可以形成 **扭转晶界**,也 满足关系式:



$$D=rac{b}{ heta}$$

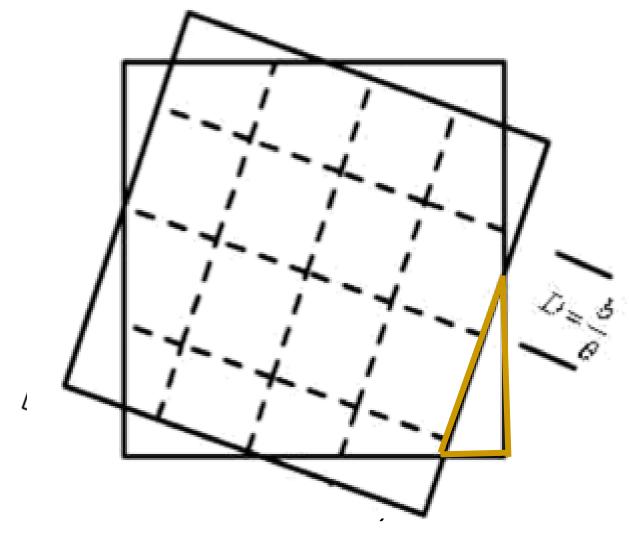


图8.2.3 螺型位错形成的扭转晶界

8.2.2 孪生晶界

晶面上的原子刚好处在取向不同的晶体的晶格的正常点阵位置上,晶面上没有显著的原子错排,它的晶界能比一般晶界低的多,这种晶界称为共格晶界。最常见的共格晶界是共格孪生晶界。此时,晶面两侧晶体的位向满足反映对称的关系,反映面即为孪生面。

例如:面心立方晶体{111}面的正常

堆垛次序为ABCABC...

若从某一层起,堆垛层次颠倒过来 为ABCACBA……,上下两部分晶体 就有了孪晶关系。

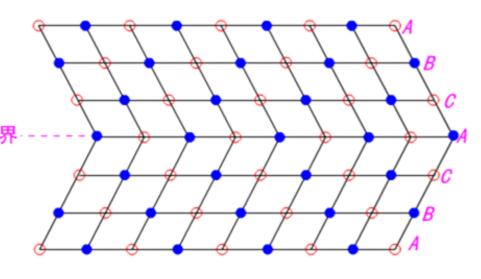


图8.2.4 孪生晶界

显然,共格孪生晶界与堆垛层错有密切关系,后者具有ABCACBA.....的层序,相当于单原子层的孪生,有相邻两个共格孪生晶界。因此,层错能相当于共格孪生晶界能的两倍。

如何产生? ① 机械孪生(形变中)

②生长孪生及退火孪生

例: Si、Ge从熔体中生长常会出现孪晶; GaAs、InSb、GaSb等III - V族化合物半导体材料用水平横拉法生长单晶时易出现孪生现象。

8.2.3 镶嵌组织、亚晶界

经理想晶体反射(实为衍射)的 X 射线角宽度,理论计算只有几秒,而实际观察却达几分以上,从而推想晶体中存在有一定位向偏差的小区域。另外,反射线强度的测量值和理论值比较也表明晶体内有线度约为10~4 cm的镶嵌块。这些晶体中的取向间有微量偏差的小区域,称作亚晶,亚结构或镶嵌结构。

亚晶界: 亚结构之间的边界

系属结构: 小角晶界的进一步密集构成系属结构

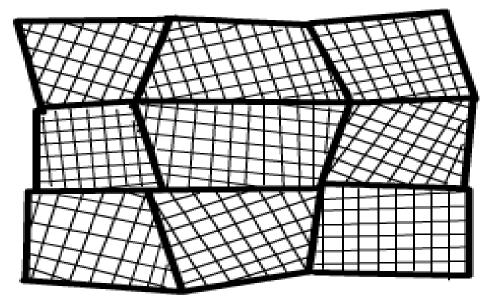
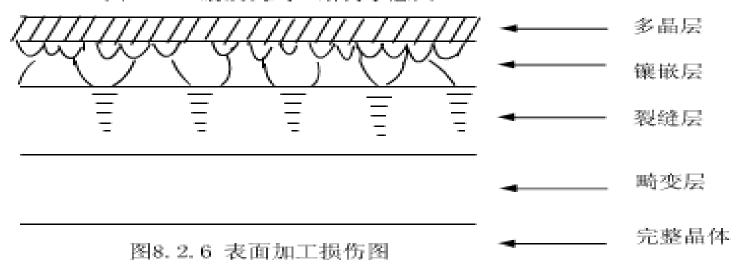


图8.2.5 镶嵌块式亚结构示意图



8.2.4 晶界能及杂质吸收 (不做课堂讲解)

8.3 相界

具有不同结构的相的边界称为相界,可分为两类:

非共格的相界 不同的晶相并不保持一定的位相关系;

共格(准共格)相界 界面两侧的晶向保持一定的位相关系,

沿界面两相有相似或相近的原子排列。

以 δ 表示两种**晶格参数间**的相对偏差,则有 $\delta = \frac{b_2 - b_1}{b_2}$ 这时相界面上的位错间距 $D = \frac{b}{\delta}$ 其中b为位错的柏氏矢量如果相界两侧的晶格在夹角上有差异 $\delta' = \frac{\theta_2 - \theta_1}{\theta_2}$ 则相界面产生螺位错的间距为 $D = \frac{b \sin \theta}{\delta'}$ b_1 和 b_2 分别是晶界两侧晶相的晶格常数

半导体外延技术中,按外延层和衬底材料组分和结构上的差异,将外延分为异质和同质外延两类。

例如:在GaAs衬底上生长GaAs_{1-x}P_x属于异质外延。

GaAs的晶格常数为0.56532nm,而GaAs_{0.6}P_{0.4}的晶格常数为0.55677nm,近似按简立方晶格考虑,估算出在晶界附近产生的位错线的间距为: $D=\frac{b}{\delta}\approx 66b$

即每隔66个晶胞便产生一条刃型位错。这种位错常称为失配位错。

在同质外延中,由于衬底和外延层所含杂质种类和浓度不同引起的晶格参数差异,也会引起失配位错的产生。

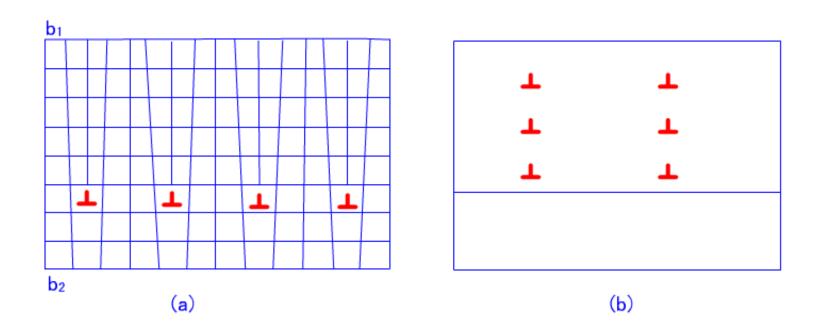


图8.3.1 晶格参数的差异产生的相界

总之, **晶界、相界、堆垛层错**等二维面状晶体缺陷称为晶体中的面缺陷。

在讨论面缺陷的形态和性能时,常把面缺陷化为一系列的位错来处理。

因为:

- ① 人们对位错的形态、性能了解的比较透彻,研究方便;
- ② 小角晶界等面缺陷,经观测表明,的确是由一系列位错排列而成。