



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 B	
许多金属晶体可看作两种密堆积结构	C
① 六方结构密堆积(<u>六方密堆积</u>):	B
ABABAB,即: △▽△▽△	A
② 四方结构密堆积(<u>立方面心密堆积</u>):	
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(层镜	昔) :
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。



 $\bigtriangleup \bigtriangleup \bigtriangleup \bigtriangleup \bigtriangleup \bigtriangleup$

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。



 $\bigtriangleup \bigtriangleup \bigtriangleup \bigtriangleup \bigtriangleup \bigtriangleup$

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。



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

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

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 $\rightarrow b = \frac{1}{3} < 111 >$ 只能产生刃型位错, 这样的位错可以攀移不能滑移







全位错与不全位错的区别:

变。

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

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: 位错的能量降低为 $\frac{a}{2}[110] \rightarrow \frac{a}{6}[121] + \frac{a}{6}[211]$ 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。



 1/2[101]
 C

 1/2[101]
 1/6[112]

 1/6[211]
 B

 1/6[211]
 B

 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







8.1.4 <u>金刚石结构</u>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 P C供主的实

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 $\theta < 10^{\circ}$)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 $_{ heta}$,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



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 <mark>共格晶界。</mark>最常见的共格晶界是<mark>共格孪生晶界。此时</mark>,晶面两侧晶体的位 向满足反映对称的关系,反映面即为<u>孪生面</u>。

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



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<mark>相界</mark>,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为位错的相氏矢量 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 $D = \frac{b\sin\theta}{\delta'}$ $b_1 \pi b_2 \beta$ 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。