第二部分 晶体缺陷



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 C 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): C ABABAB, $\mathbb{P}_{:} \land \nabla \land \nabla \land \cdots$ B (2)四方结构密堆积(立方面必密堆积): ABCABC, $\mathbb{P}_{:}$ $\triangle \triangle \triangle \dots$ Frank 符号: \triangle 表示AB、BC、CA; ∇ 表示BA、CB、AC。 苦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: $\Delta \nabla \Delta \Delta \Delta \nabla$ …… 四方密堆积晶体层错: △△▽△△

面 化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。



面 化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。



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得主要 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火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,由于由两组面火 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 必 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。

请区别"棱位错"与"不完全位错"!!

面火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 $\vec{b} = \frac{a}{6} < 112 > 6$

这样可以产生纯刀、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, $\vec{b} = \frac{a}{3} < 111 > 只产生刀型位错$

这样的刃型位错,可以攀移却不能滑移。

可以通过面火立方密堆积结构的晶胞来理解上述规律



图8.1.2 肖克莱位错



图8.1.3 负弗兰克位错



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。

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(位错的能量降低为原来的2/3):

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

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。



图8.1.5 面火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 $\frac{a}{6}[121]$ 滑移的区域与按 $\frac{a}{6}[121]$ 滑移的区域 重合时,就产生柏氏矢量 为 $\frac{a}{2}[110]$ 的全位错。



展位错。

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火立方子格子套构而成,正



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条, 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定整区的交界处,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,会出现大量是挂键。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。从能量角度 看不容易崩塌、在硅晶体中 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 金刚石塑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 例的晶格取向将会出现一个 θ 角 的偏差,(通常 $\theta < 10^\circ$)就称为小 角晶界₀



D为位错间距离; b为柏氏矢量



如果交界面是任意的(hk0)

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



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。



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所谓系属结构



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*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: \mathbf{a}_{GaAs} 初底上生长 $GaAs_{1-x}P_x$ 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

⁽¹⁾ 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。