

Лекция 8

8. Дислокации в кристаллах. Границы зерен

Плотность дислокаций – это число линий дислокаций, пересекающих единичную площадку в кристалле. Ее размерность [см^{-2}].

Плотность дислокаций – важнейшая техническая характеристика качества кристалла. В кристаллах, выращенных обычными методами кристаллизации расплава, плотность дислокаций составляет $10^4 - 10^6 \text{ см}^{-2}$, путем обжига можно понизить эту плотность до $10^3 - 10^4 \text{ см}^{-2}$.

В результате пластической деформации плотность дислокаций возрастает на несколько порядков.

Наилучшие полупроводниковые кристаллы, полученные путем выращивания, имеют плотность дислокаций $10^2-10^3 \text{ см}^{-2}$ и даже порядка нескольких единиц на квадратный сантиметр. Существуют и бездислокационные кристаллы.

Чтобы лучше представить приведенные цифры, заметим, что при плотности дислокации 10^3 см^{-2} общая протяженность линий дислокаций в 1 мм^3 кристалла составляет один километр.

В таблице 10 приведены значения плотности дислокации металла в разных состояниях, [см^{-2}].

Таблица 10

Тщательно выращенный массивный монокристалл очень высокой чистоты	Менее 10^3
Отожженный обычный монокристалл	$10^4 \div 10^6$
Отожженный поликристалл	$10^7 \div 10^8$
Металл после холодной деформации высокой степени	$10^{11} \div 10^{12}$

3. Основные типы дислокаций.

Вектор Бюргерса

Дислокацией называется линейное несовершенство, образующее внутри кристалла границу зоны сдвига.

Поясним это самое общее определение дислокации.

На рисунке 55 показан параллелепипед, верхняя часть которого сдвинута относительно нижней на одно межатомное расстояние.

АВСД – участок плоскости скольжения, в котором произошел сдвиг, *АВ* – граница этого участка.

На рисунке 56 для случая примитивной кубической решетки показан разрез по атомной плоскости.

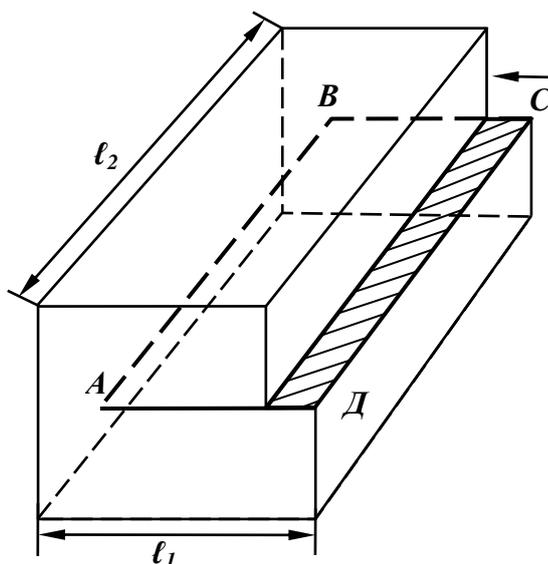


Рисунок 55 – Схема сдвига, создавшего краевую дислокацию AB (стрелка C – вектор сдвига)

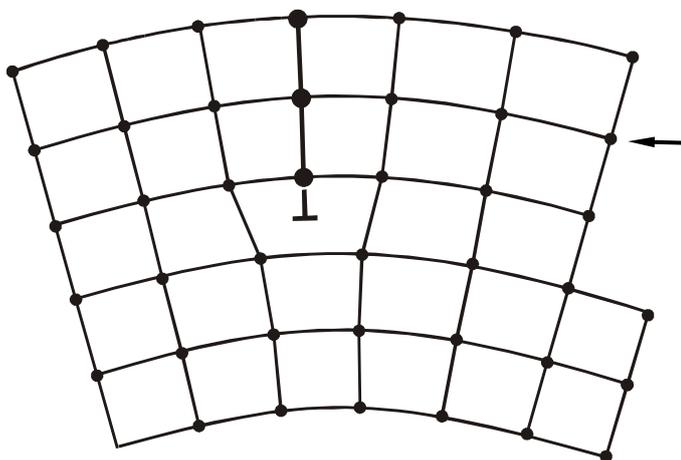


Рисунок 56 - Краевая дислокация в примитивной кубической решетке (стрелка – вектор сдвига)

В результате сдвига на одно межатомное расстояние n вертикальных атомных плоскостей, расположенных выше плоскости скольжения, оказываются напротив $(n - \ell)$ плоскостей, расположенных ниже плоскости скольжения. Одна вертикальная плоскость в верхней половине кристалла не имеет продолжения в нижней половине. Такая «лишняя» неполная атомная плоскость называется экстраплоскостью.

Область несовершенства кристалла вокруг края экстраплоскости называется краевой дислокацией. В одном измерении размер этой дислокации такой же, как и длина края экстраплоскости, т.е. макроскопический. В перпендикулярной плоскости размер дислокации очень мал – от двух до десяти атомных диаметров. Положение центра ядра дислокации обозначается значком \perp .

Если экстраплоскость находится в верхней части кристалла, то дислокацию называют положительной. А если в нижней – то отрицательной.

Положение центра ядра отрицательной дислокации обозначают T .
 Понятие о винтовой дислокации ввел в 1939 году Бюргерс.

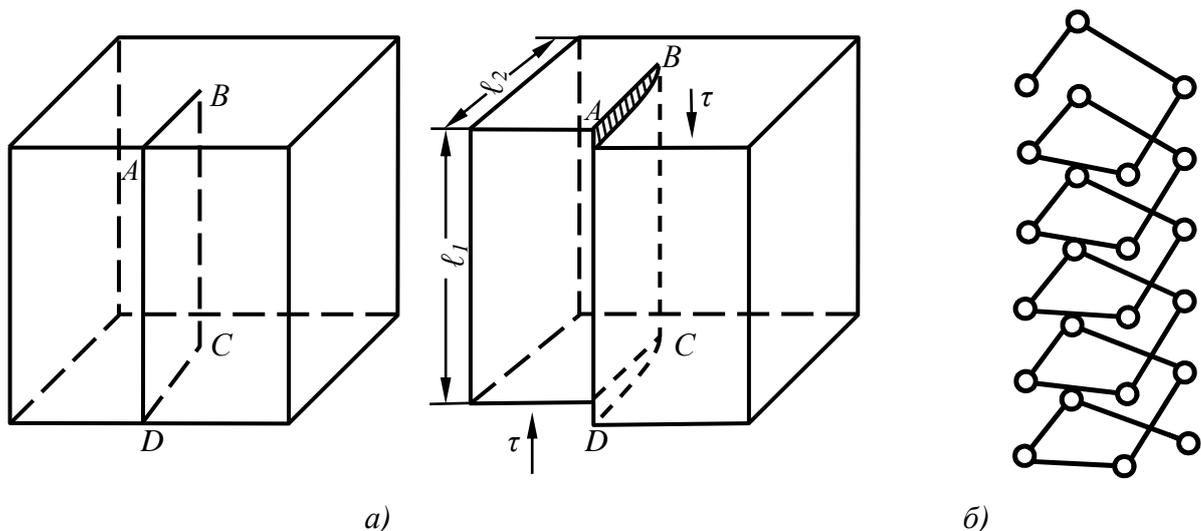


Рисунок 57 - Схема винтовой дислокации:
 а) сдвиг, создавший винтовую дислокацию;
 б) расположение атомов в области винтовой дислокации

Сделаем в кристалле надрез по плоскости $ABCD$ (рисунок 57 а) и произведем сдвиг правой (передней части кристалла) вниз на один период решетки. Образовавшаяся при таком сдвиге ступенька на верхней грани не проходит через всю ширину кристалла, оканчиваясь в точке B . Так как надрез $ABCD$ дошел только до середины кристалла, то прямая часть не может сдвинуться целиком по отношению к левой на один период решетки. Величина смещения правой части по отношению к левой уменьшается по направлению от точки A к точке B . Верхняя атомная плоскость оказывается изогнутой. Точно также деформируется вторая атомная плоскость сверху; первая часть ее у передней грани смещается на один период решетки и сливается с третьей и т.д.

На рисунке 57б показано расположение атомов в двух вертикальных плоскостях, проходящих непосредственно по обе стороны от плоскости сдвига $ABCD$.

Появившаяся в результате описанного сдвига область несовершенства называется винтовой дислокацией, т.к. атомы расположены в ней по «винтовой лестнице».

Винтовая дислокация так же, как и винт, может быть правой и левой. Они превращаются друг в друга зеркальным отражением.

Основные отличия винтовой дислокации от краевой:

- 1) винтовая дислокация параллельна вектору сдвига;
- 2) винтовая дислокация может быть образована при сдвиге любой кристаллографической плоскости, содержащей линию дислокаций, по любой поверхности, оканчивающейся на этой линии.

Дислокация не может закончиться внутри кристалла. Следовательно, линия дислокации может замыкаться внутри кристалла или оканчиваться на его поверхности.

На рисунке 58а линия дислокации состоит из прямых участков кривой и винтовой дислокаций, перпендикулярных и параллельных вектору сдвига. В более общем (рисунок 58 б) случае линия дислокации является плавной.

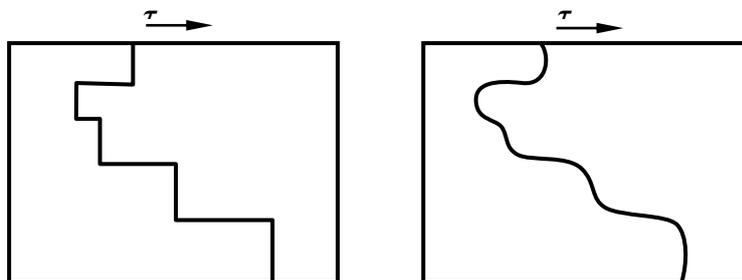


Рисунок 58 - Краевые и винтовые дислокации образуют непрерывную ломаную (а) или плавную (б) линии дислокаций в кристалле

Отдельные участки этой дислокации имеют краевую или винтовую дислокацию, но большая часть ее не параллельна и не перпендикулярна вектору сдвига, такая дислокация называется смешанной (рисунок 59).

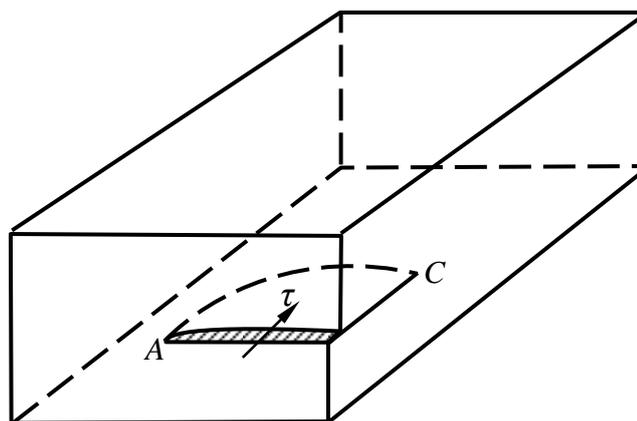


Рисунок 59 - Схема сдвига, создавшего смешанную дислокацию AC

Линии смешанной дислокации могут оканчиваться на гранях кристалла, а могут образовывать замкнутые плоскости внутри кристалла – дислокационные петли, которые играют важную роль в процессах пластической деформации.

Вектор Бюргерса является мерой искаженности кристаллической решетки, обусловленной присутствием в ней дислокаций. Он определяет энергию дислокаций, величину сдвига, влияет на подвижность дислокации и, таким образом, является главной количественной характеристикой дислокации.

Чтобы оценить степень искаженности решетки, вызванной дислокацией, следует сравнить совершенный кристалл с несовершенным, содержащим дислокацию. Для этого используют построение, называемое контуром Бюргерса.

Контуром Бюргерса называется замкнутый контур произвольной

формы, построенный в реальном кристалле путем последовательного обхода дефекта от атома к атому в совершенной области кристалла (рисунок 60).

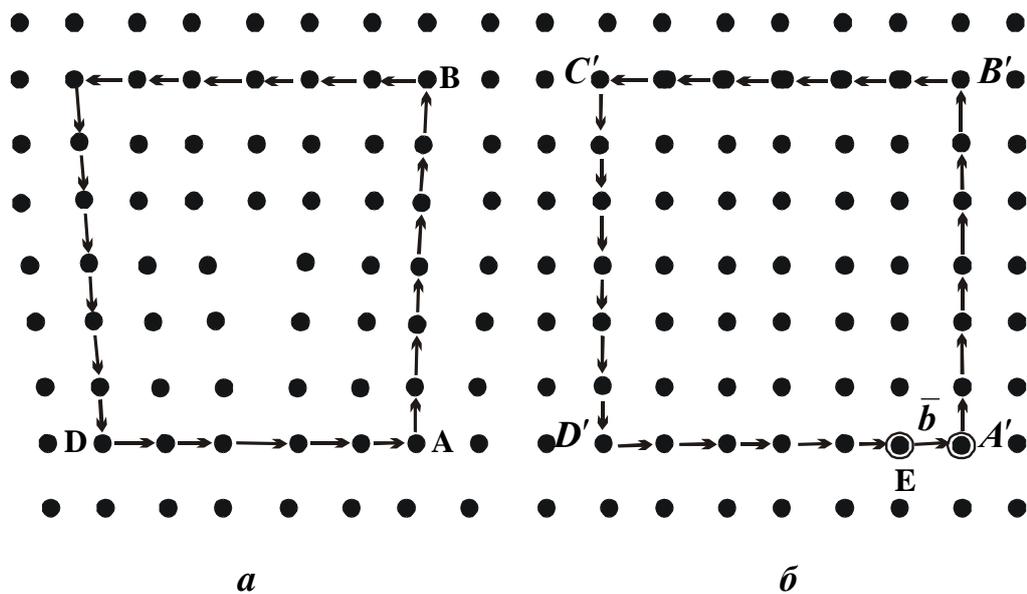


Рисунок 60 – Контур Бюргера вокруг краевой дислокации (а) и эквивалентный контур в совершенном кристалле (б). \vec{b} - вектор Бюргера

Вектор Бюргера характеризуется рядом особенностей:

- вектор Бюргера нормален к линии краевой дислокации и параллелен к линии винтовой дислокации. В случае смешанной дислокации угол между линией дислокации и вектором Бюргера имеет разную величину;
- вектор Бюргера у дефектов недислокационного типа равен нулю;
- вектор Бюргера одинаков вдоль всей линии дислокации, т.е. является инвариантом дислокации.

Поскольку вектор Бюргера столь важная количественная характеристика дислокации, необходимо уметь обозначать его так, чтобы запись отражала и направление, и величину вектора.

Принято записывать вектор Бюргера в виде:

$$\vec{b} = na \langle hkl \rangle,$$

где $\langle hkl \rangle$ - символ кристаллографического направления вектора \vec{b} ;

a – параметр решетки в этом направлении;

n – целое число.

Мощность дислокации – это величина, определяемая по формуле:

$$|b| = na \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}.$$

Таким образом, *вектор Бюргера* – это мера искажений решетки, вызванных дислокациями. Его численное значение характеризуется мощностью.