

§ 11. Дислокации

Рассмотренные выше структурные дефекты — примесные атомы, вакансии и комбинации вакансий с междоузельными атомами — нарушают правильное расположение атомов в пределах небольшого объема, порядка нескольких элементарных ячеек, и поэтому могут быть названы точечными дефектами. Кроме того, в кристаллах могут быть еще линейные структурные дефекты в виде так называемых дислокаций. Они образуются при деформации сдвига в результате скольжения атомных плоскостей друг относительно друга.

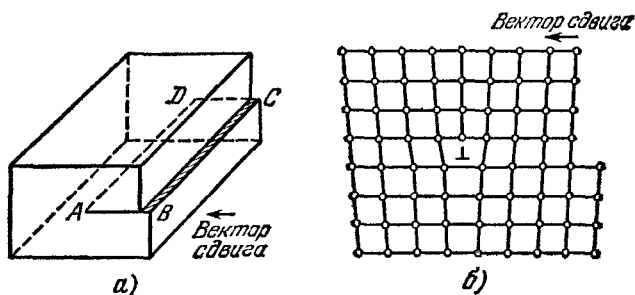


Рис. 2.23. а) Образование линейной дислокации при сдвиге. Линейная дислокация AD перпендикулярна к вектору сдвига. б) Расположение атомов в плоскости, перпендикулярной к линейной дислокации, в простом кубическом кристалле.

Если бы скольжение происходило по всей атомной плоскости кристалла, то все атомы этой плоскости передвинулись бы на одинаковые расстояния в одну или несколько постоянных решетки в направлении сдвига и заняли бы новые положения, идентичные прежним. Однако в действительности скольжение происходит только на части атомной плоскости. Это показано схематически на рис. 2.23, а, где $ABCD$ есть площадь сдвига. В результате вокруг линии AD , отделяющей зону сдвига, образуется характерное искажение решетки. Линия AD называется линейной (или краевой) дислокацией и обозначается значком \perp . Линейная дислокация всегда перпендикулярна к направлению сдвига.

Расположение атомов в плоскости, перпендикулярной к дислокации, для случая простой кубической решетки показано на рис. 2.23, б. В результате сдвига образовалась одна неполная атомная плоскость, край которой и есть линейная дислокация. Из рисунка также видно, что вблизи дислокации решетка упруго деформирована, причем имеются как области сжатия, так и области растяжения.

Эти деформированные области возникают и у поверхности кристалла вблизи точек выхода дислокаций на поверхность. Поэтому скорость растворения кристалла в различных травителях изменяется вблизи этих точек. На этом обстоятельстве основан широко распространенный способ обнаружения дислокаций по «ямкам травления». Разумеется, для получения четкой картины нужны специально подобранные травители, разные для разных кристаллов (а иногда и для разных граней). Дислокационные ямки травления отличаются от других макроскопических дефектов (например, посторонних включений, раковин и т. п.) правильной формой, отражающей симметрию расположения атомов на данной грани.

Вследствие механических напряжений вокруг дислокаций потенциальная энергия примесных атомов вблизи дислокаций меньше, нежели вдали от них. Поэтому легко диффундирующие примеси могут накапливаться вокруг дислокаций, образуя примесную «атмосферу» вокруг них. Пользуясь этим обстоятельством, можно сделать дислокации видимыми. Так, например, можно видеть дислокации в кремнии, вводя в него диффузией медь и получая затем изображение внутренности кристалла в близком инфракрасном свете с помощью микроскопа и электронно-оптического преобразователя. Так как сам кремний хорошо прозрачен для длин волн $\lambda \gtrsim 1$ мкм, то при этом получается четкое изображение дислокаций, сделавшихся непрозрачными вследствие образования примесной атмосферы меди.

Дислокации могут возникать самопроизвольно в процессе роста кристалла. Такие «врожденные» дислокации могут образоваться вследствие деформаций при неравномерном охлаждении кристалла, вследствие неравномерности скорости затвердевания кристалла, а также в результате распространения дислокаций из затравки и других причин.

Если, напротив, в кристалле необходимо создать дислокации, то для этого удобно использовать пластическую деформацию и, в особенности, изгиб кристалла. При простом изгибе плотность дислокаций (т. е. число дислокаций на 1 см^2 , перпендикулярный направлению дислокаций) обратно пропорциональна радиусу кривизны нейтральной плоскости и может быть теоретически рассчитана. Кроме того, при изгибе можно получить чисто линейные дислокации, одинаково направленные и параллельные оси изгиба.

Интересный случай упорядоченного расположения дислокаций наблюдается на границе двух сросшихся монокристалльных блоков, разориентированных на малый угол. Эти так называемые «границы зерен под малым углом» могут возникать самопроизвольно в процессе кристаллизации или могут быть созданы преднамеренно, если вести кристаллизацию с помощью двух идентичных затравок,

составляющих малый угол. В этом случае соединение двух частей бикристалла осуществляется с помощью ряда параллельных дислокаций, образующих «дислокационную стенку» (рис. 2.24). Из рисунка видно, что среднее расстояние между соседними дислокациями равно $D = b/\theta$, где θ — угол между зернами (в радианах), а b — расстояние между атомами в направлении скольжения. При травлении поверхности кристалла, на которую выходят дислокации, получается упорядоченное расположение ямок травления вдоль определенных линий, указывающее границу двух слабо разориентированных областей кристалла.

При термической обработке кристалла, в котором имеются механические напряжения, в нем происходит пластическая деформация. Это осуществляется путем перемещения дислокаций. При этом часто образуется целая система дислокационных стенок, которая превращает кристалл в собрание отдельных зерен, разориентированных на малые углы (явление «полигонизации»).

Если линейная плотность дислокаций $1/D$ на границах зерен становится очень большой, то становится большим и угол разориентации θ . При этом кристалл уже нельзя рассматривать как единый монокристалл с искаженной структурой, и он превращается в поликристаллическое вещество.

Помимо рассмотренных выше линейных (или краевых) дислокаций, существует еще другой тип структурных дефектов, называемых винтовыми дислокациями (см., например, [6]).

Дислокации, подобно примесным атомам и точечным структурным дефектам, создают дополнительные электронные состояния в запрещенной зоне энергий. В § 9 мы видели, что, анализируя особенности химических связей вблизи примесных атомов, можно сделать определенные заключения о характере возникающих локальных уровней. Попытаемся теперь подойти с этой точки зрения к дислокации и рассмотрим, следуя В. Шокли, линейную дислокацию в решетке типа алмаза (например, в германии или кремнии). На рис. 2.25, а изображено расположение атомов в решетке такого

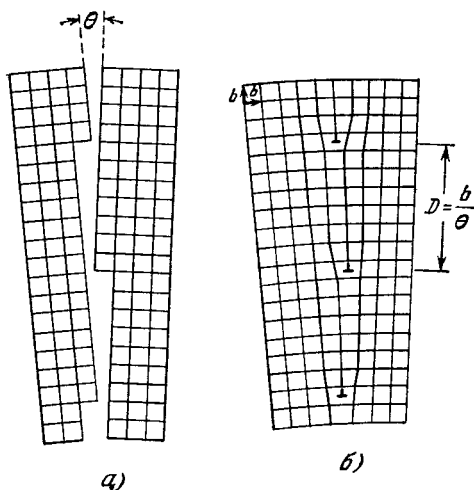


Рис. 2.24. Граница зерен под малым углом (схематически): а) расположение атомных плоскостей в обоих зернах; б) соединение зерен с помощью ряда параллельных дислокаций.

типа *). Оно соответствует элементарной ячейке алмаза, изображенной на рис. 2.9, но здесь показано большее число атомов. Как и раньше, линиями показаны направленные валентные связи, которые соединяют каждый атом с четырьмя его ближайшими соседями. На рис. 2.25, б показана та же группа атомов при наличии

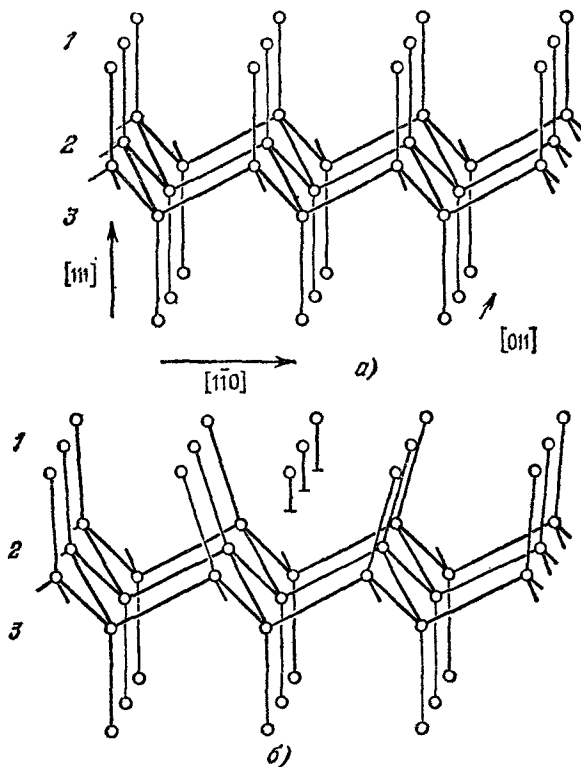


Рис. 2.25. а) Расположение атомов в структуре алмаза. б) Один из возможных типов линейной дислокации в структуре алмаза (по В. Шокли). Дислокация возникла вследствие частичного сдвига плоскости 1 относительно плоскости 2. Показаны также три атома на крае неполной атомной плоскости и их неспаренные, или «болтающиеся», связи.

линейной дислокации, возникающей в результате частичного сдвига атомной плоскости 1 относительно плоскости 2. На рисунке отмечены также основные кристаллографические направления. Сдвиг произошел в плоскости (111) в направлении $[1\bar{1}0]$. Дислокация

*) W. T. Read, Phil. Mag. 45, 775 (1954).

направлена вдоль оси $[01\bar{1}]$. Над плоскостью сдвига имеется ряд атомов (на рисунке показаны три из них), лежащих на крае неполной атомной плоскости, которые не имеют соответствующих соседей снизу. Поэтому каждый из этих атомов имеет по одному неспаренному электрону, которые образуют ненасыщенные, или (следуя терминологии Шокли) «болтающиеся», связи.

Отметим, что указанная конфигурация ненасыщенных связей не является единственно возможной. Так, например, при частичном сдвиге плоскостей 2 и 3 относительно друг друга структура связей оказалась бы другой.

Неспаренные электроны на крае неполной атомной плоскости и приводят к появлению дополнительных состояний. При этом, в принципе, следует учитывать две возможности. Во-первых, на ненасыщенную связь может быть захвачен второй электрон, отчего возникнет парно-электронная связь. Если энергия этого электрона окажется меньше, чем в зоне проводимости, но больше, чем в валентной зоне, то в запрещенной зоне будет разрешенное состояние для электронов. Дислокация окажется способной присоединять к себе дополнительный электрон и будет проявлять себя подобно акцепторам. Во-вторых, ненасыщенная связь может быть разорвана, и тогда неспаренный электрон превратится в электрон проводимости. Если энергия неспаренного электрона имеет промежуточное значение между энергиями электронов в зоне проводимости и в валентной зоне, то дислокация будет подобна донорам с энергетическими уровнями внутри запрещенной зоны.

Таким образом, линейные дислокации по электрическим свойствам имеют сходство с примесными центрами. Однако между ними имеются и существенные различия. В случае примесных центров локальные уровни в среднем распределены приблизительно изотропно в каждой макроскопической области кристалла. В случае же дислокаций распределение отдельных «центров» крайне анизотропно. Среднее расстояние между ними очень мало вдоль дислокаций (расстояние между соседними болтающимися связями). Поэтому в отсутствие примесных атмосфер дислокации следует представлять скорее как одномерные кристаллы, нежели как неравномерно распределенные точечные центры. Соответственно вместо локальных уровней энергии точечных дефектов (рис. 2.19) в этом случае правильнее говорить об энергетических зонах, создаваемых дислокациями в запрещенной зоне («дислокационные зоны»). При наличии примесных атмосфер вблизи дислокаций могут возникать и дискретные локальные уровни.

Пользуясь изложенными представлениями, можно приближенно рассматривать линейную дислокацию как заряженную линию. Если проявляются акцепторные свойства дислокации, то в материале n -типа она будет заряжена отрицательно. При этом, вслед-

ствии отталкивания от нее электронов проводимости, дислокация будет окружена цилиндрическим слоем индуцированного положительного заряда.

Из этой модели, далее, следует, что дислокации, как и примесные центры, должны вызывать дополнительное рассеяние электронов и, следовательно, уменьшать их подвижность. При этом можно ожидать, что если ток течет параллельно дислокациям, то их влияние будет мало, так как в этом случае основная часть электронов будет двигаться вне цилиндрических областей объемного заряда, за пределами которых электрическое поле заряженных дислокаций равно нулю. Если же ток течет перпендикулярно дислокациям, то траектории электронов должны существенно изменяться и подвижность электронов должна уменьшаться сильнее.

Влияние линейных дислокаций на электрические свойства полупроводников действительно наблюдается на опыте. Так, например, создание дислокаций в германии *n*-типа приводит к уменьшению концентрации электронов проводимости. Это показывает, что в германии дислокации создают локальные состояния акцепторного типа. При этом уменьшается и подвижность электронов.

Дислокации могут действовать также как эффективные центры рекомбинации (см. гл. IX) и существенно изменять кинетику электронных процессов.