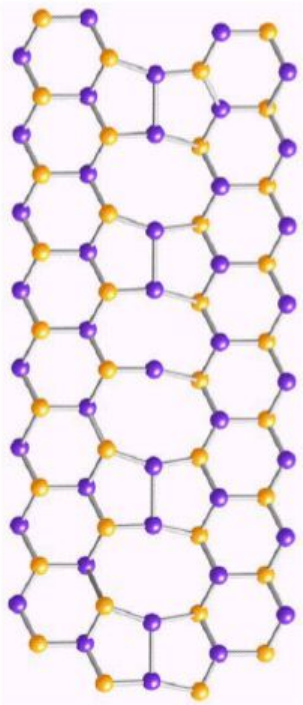


# *Физика реального кристалла*



12. *Откуда берутся дислокации?  
Механизмы размножения и движения  
дислокаций.*

*Профессор Б.И.Островский*

[ostr@cea.ru](mailto:ostr@cea.ru)

*Необходимо понять:*

- 1. Почему в кристаллах изначально присутствуют дислокации?*
- 2. Почему дислокации размножаются при напряжениях много меньших теоретического порога текучести ?*

*Откуда берутся дислокации?*

# Dislocations and crystal growth

- Thermodynamically stable density of dislocations in a stress-free crystal is zero
- Nevertheless, dislocations occur in all crystals
- Introduction during the growth process
- Dislocations or other defects in the seed give rise to the extension of dislocations in the growing crystal

## *Other processes:*

- Heterogeneous nucleation of dislocations due to internal stress of particles, thermal expansion/contraction
- Formation of dislocation loops due to aggregation of supersaturated point defects
- Impingement of different parts of the growing interface with imperfect matching (**misfit**)

# Extension of dislocations from the seed

---

X-ray topography of dislocations and microdefects. A cross section of the neck region of a silicon crystal is shown. The seed was located above.

[Bohm 1995]

Growth direction



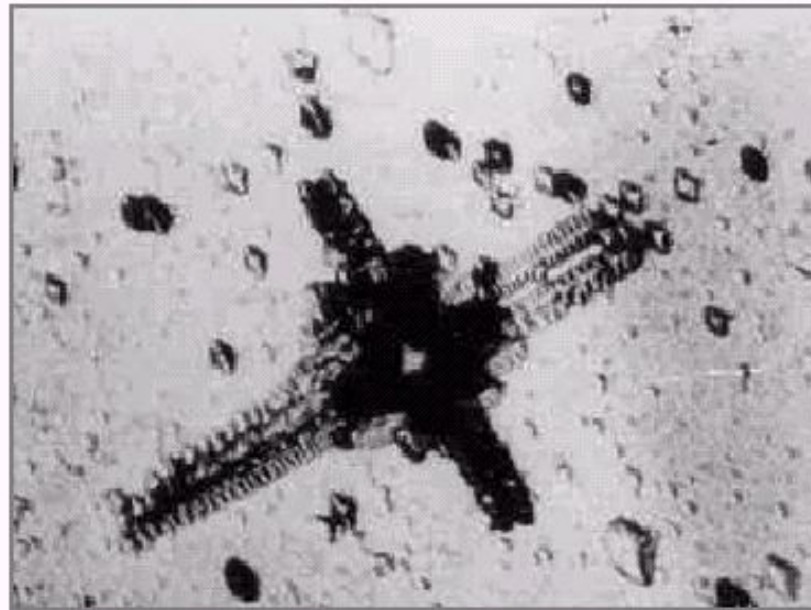
## *Дислокации несоответствия*

---



Misfit dislocations in (001) ZnSe/GaAs. MBE growth, layer thickness 495 nm.  
TEM bright field image.

*Гетерогенное зарождение дислокаций  
под действием источника («концентратора»  
напряжений*



*Отпечаток  
индентора!*

Example for the generation of dislocations in the local stress field of a Vickers indentation in (001) GaAs. The generated dislocations are visualized by etching in a KOH melt.

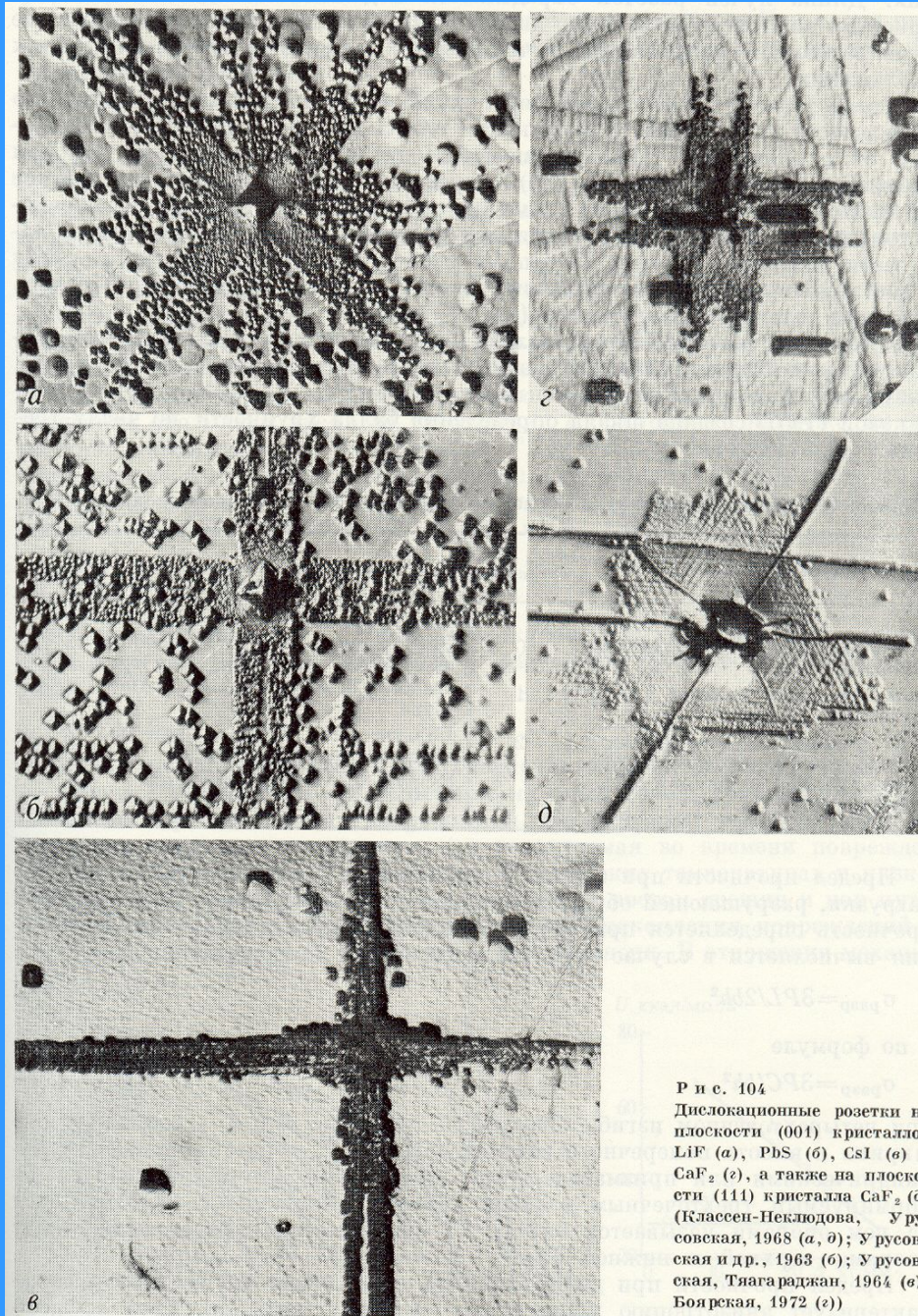
## Определение способности кристалла к пластической деформации

В последние 15—20 лет для быстрого контроля способности кристалла к пластической деформации изучают форму и размер дислокационных розеток, образующихся вокруг отпечатка индентора и выявляемых методом избирательного травления. На рис. 104 приведены фотографии дислокационных розеток на плоскости куба кристаллов LiF, PbS, CsI, CaF<sub>2</sub> и на плоскости октаэдра кристалла CaF<sub>2</sub>. Ямки травления, появившиеся в месте выхода на поверхность кристалла линий дислокаций, выстроены в ряды, параллельные линиям пересечения испытываемой поверхности с плоскостями скольжения. Длина лучей розеток определяется подвижностью дислокаций: чем кристалл пластичнее, тем легче двигаются в нем дислокации и тем длиннее лучи розеток; по направлению лучей розеток судят об активных плоскостях скольжения.

Более точно о подвижности дислокаций в кристаллах можно судить по зависимости длины пробега дислокаций или скорости перемещения дислокаций от напряжения. Пути перемещения дислокаций фиксируют методом избирательного травления (см. § 3), а средние скорости находят как частное от деления длины пробега на время действия нагрузки. В случае щелочно-галоидных кристаллов дислокации при напряжениях в области предела текучести двигаются с очень большими скоростями ( $\sim 10^{-3}$  см/сек) и, чтобы с достаточной точностью определить пробег дислокаций, используют очень короткие импульсы нагружения (до  $10^{-6}$  сек).



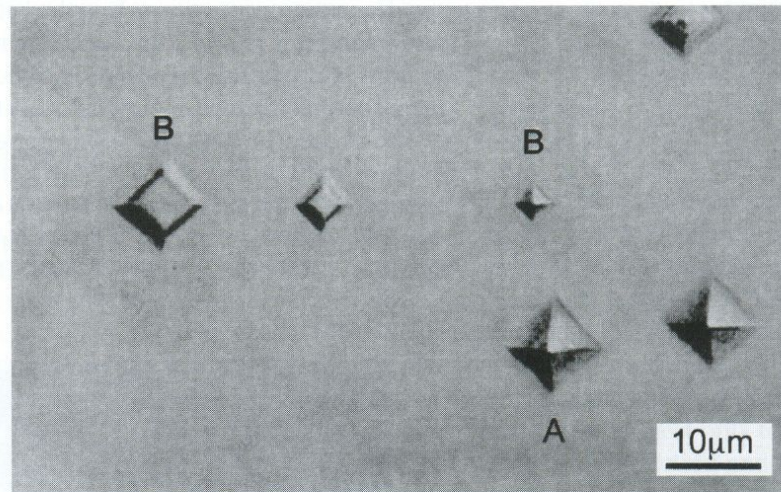
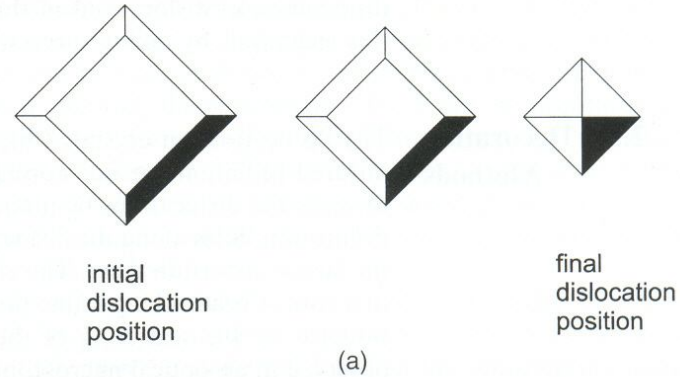
$$V_d = \Delta l / \Delta t$$



Р и с. 104

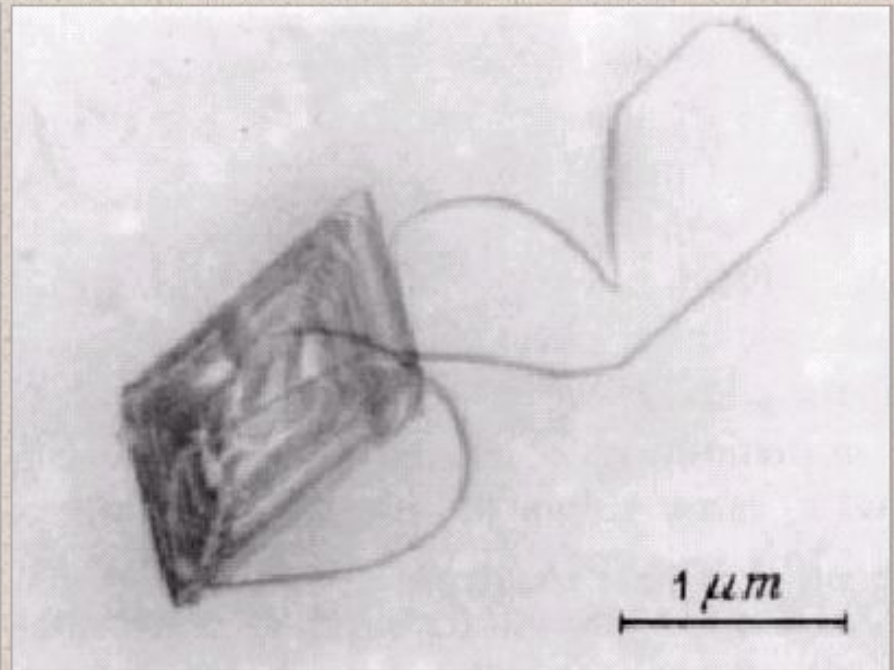
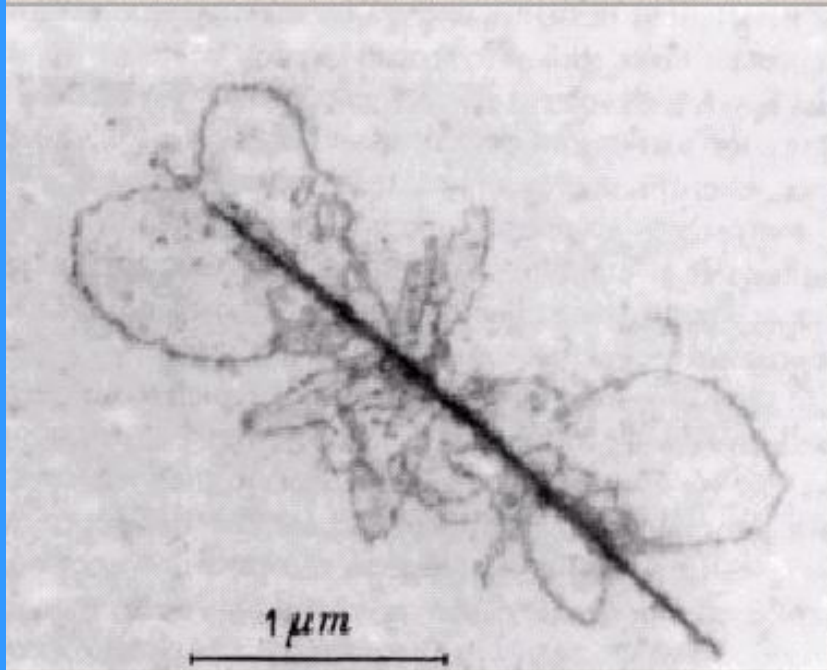
Дислокационные розетки на плоскости (001) кристаллов LiF (а), PbS (б), CsI (в) и CaF<sub>2</sub> (г), а также на плоскости (111) кристалла CaF<sub>2</sub> (д) (Класен-Неклодова, Урусовская, 1968 (а, д); Урусовская и др., 1963 (б); Урусовская, Тягаграджан, 1964 (в); Боярская, 1972 (г))

# Избирательное травление



**Figure 2.4** Etch pits produced on a lithium fluoride crystal. The crystal has been etched three times. The dislocation at *A* has not moved between each etching treatment and a large pyramid-shaped pit has formed. The dislocation revealed by the three pits *B* moved between etching treatments to the positions indicated by the pits. Subsequent etching of a pit after the dislocation has moved produces a flat bottom pit. (From Gilman and Johnston (1957), *Dislocations and Mechanical Properties of Crystals*, p. 116, Wiley.)

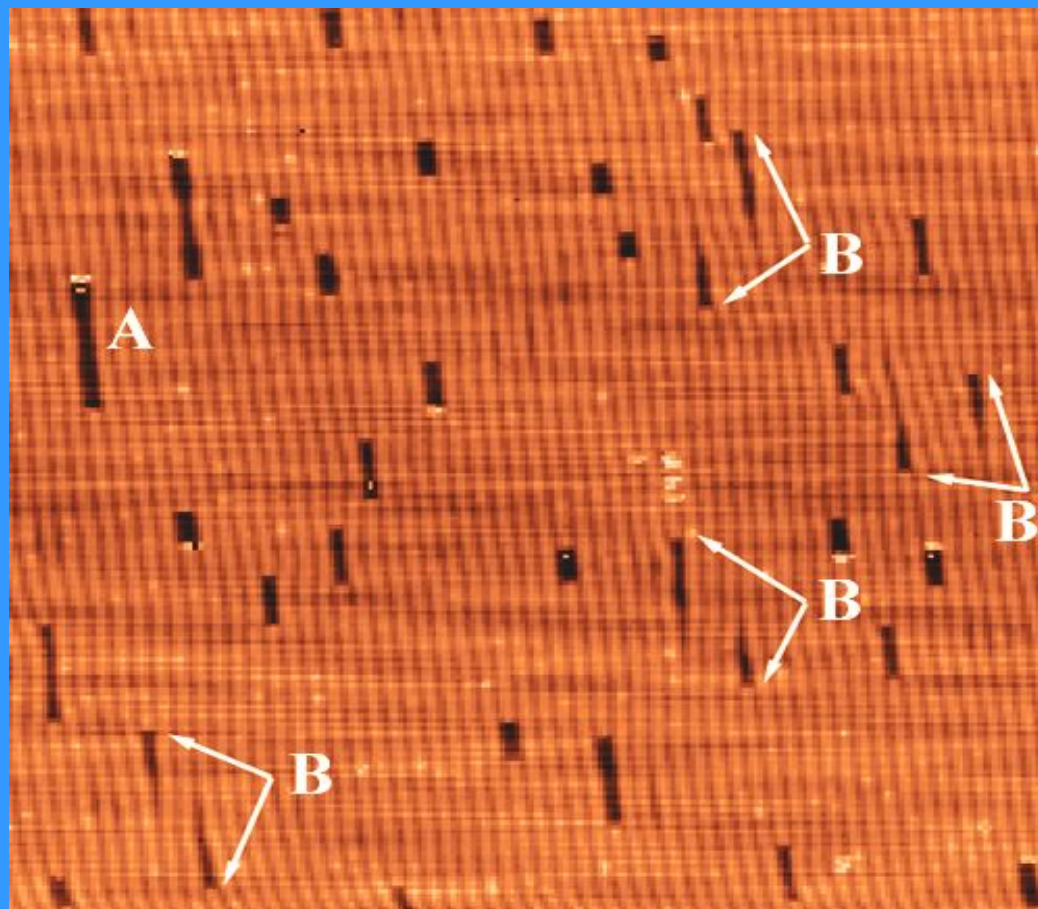
# Nucleation of dislocation at microdefects



Formation of dislocations at oxygen-related precipitates in silicon  
[Gleichmann *et al.* 1987]

# Облучение поверхности быстрыми частицами

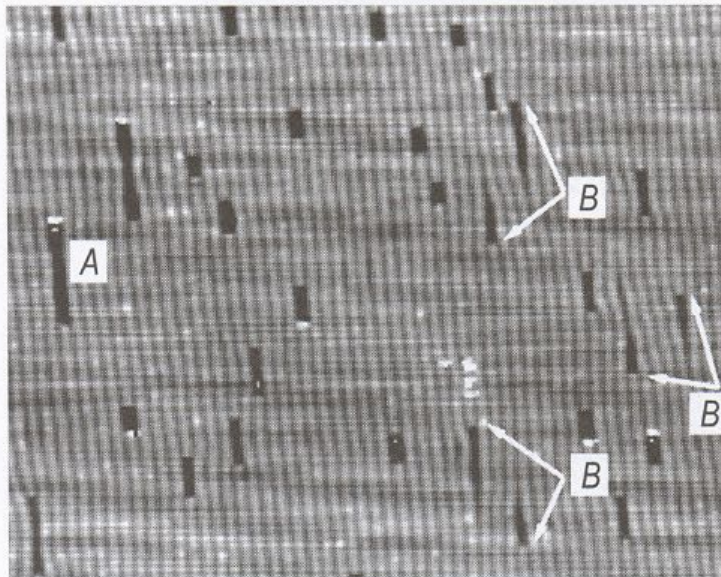
СТМ реконструкция



Oscar Rodríguez de la Fuente, Ph.D. Thesis, UCM

**Поверхностные дислокации в слое Au(100).** Подобно поверхности Pt(100), описанной в разделе 7.3.1., реконструированная поверхность Au(100) состоит из плотноупакованного квазигексагонального атомного слоя, расположенного поверх слоев Au(100), в которых атомы образуют квадратную решетку. Реконструированная поверхность имеет периодичность  $5 \times n$  ( $n \simeq 25$ ) и выглядит на СТМ изображениях в виде рядов, ширина которых соответствует короткому периоду ( $14,4 \text{ \AA}$ ) реконструкции. Ряды бегут вдоль направления  $\langle 011 \rangle$  подложки. Верхний слой атомов относительно слабо связан с нижележащими слоями.

Если поверхность Au(100) подвергнуть малой дозе ( $\sim 0,05 \text{ МС}$ ) бомбардировки ионами  $\text{Ar}^+$  с энергией  $600 \text{ эВ}$  при температуре  $300 \text{ К}$ , на ней образуются дефекты двух типов (рис. 9.21).



**Рис. 9.21.** СТМ изображение ( $830 \times 830 \text{ \AA}^2$ ) поверхности Au(100) после бомбардировки  $0,05 \text{ МС}$  ионов  $\text{Ar}^+$  с энергией  $600 \text{ эВ}$ . Видны два типа дефектов: впадины (A) и индивидуальные 2D дислокации (B). Последние существуют парами, как это помечено стрелками [9.13])

# Эффекты механических напряжений при гетероэпитаксии

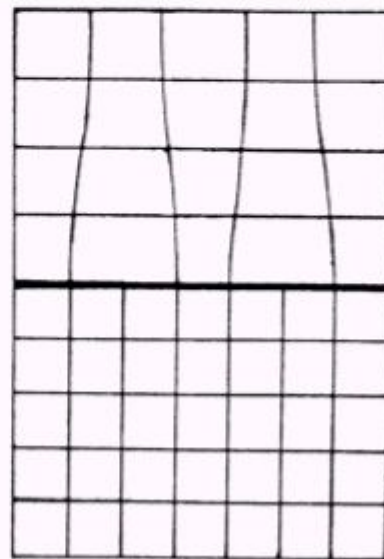
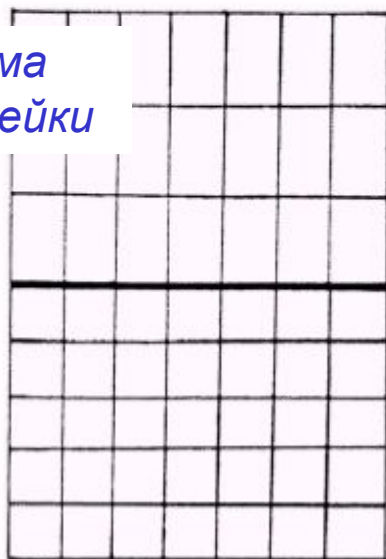
Дислокации несоответствия



Tetragonally distorted layer

Relaxed layer with **misfit dislocations**

Сохранение объема  
элементарной ячейки



Epitaxial layer

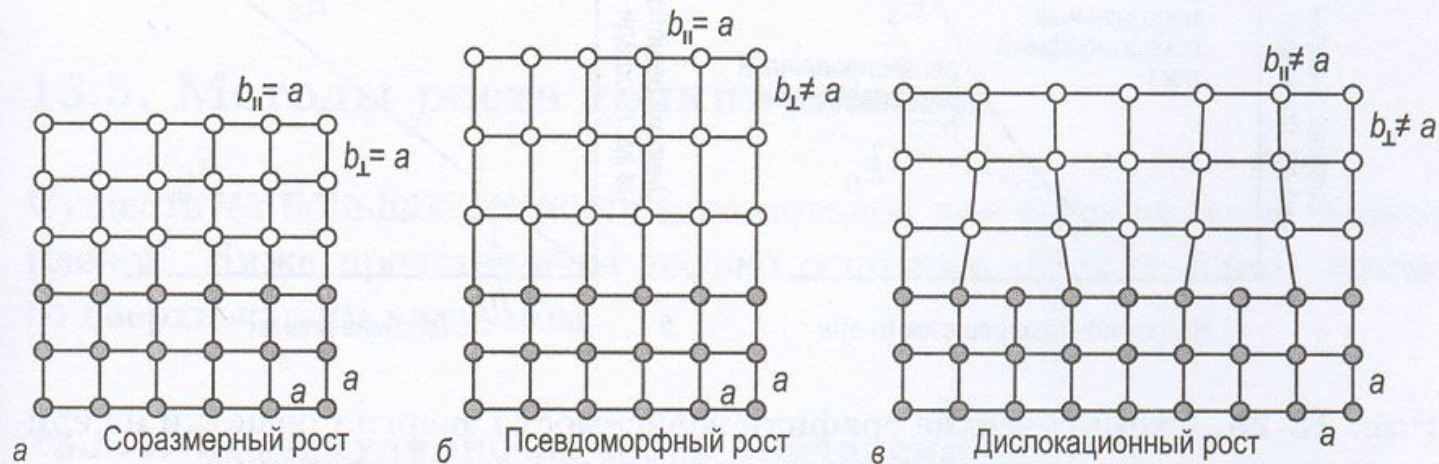
Substrate

$$\varepsilon = (b-a)/a$$

## Несоответствие решеток

При *гетероэпитаксии* кристаллическая пленка одного материала вырастает на кристаллической подложке другого материала. Ориентация решетки пленки относительно решетки подложки обычно описывается в терминах параллельности кристаллографических плоскостей и направлений: например,  $\text{Al}(110) \parallel \text{Si}(100)$ ,  $\text{Al}\langle 001 \rangle \parallel \text{Si}\langle 011 \rangle$  означает, что эпитаксиальная пленка Al ориентирована таким образом, что ее плоскость (110) параллельна поверхности подложки Si(100), а азимутальное направление  $\langle 001 \rangle$  пленки совпадает с направлением  $\langle 011 \rangle$  на поверхности Si(100).

Так как подложка и пленка состоят из разных материалов, очень редко они имеют одну и ту же постоянную решетку и имеет место идеальный *соразмерный* рост (рис. 13.24, а). Чаще всего кристаллическая структура пленки и подложки различны. Количественная характеристика этого различия – *несоответствие решеток* (*misfit*), которое определяется как относительная разность постоянных решеток:  $\varepsilon = (b - a)/a$ . Относительно низкие несоответствия решеток мо-



**Рис. 13.24.** Схематическая диаграмма, иллюстрирующая механизмы роста гетероэпитаксиальных пленок,

*a* – соразмерный рост при совпадении решеток; *б* – напряженный псевдоморфный рост; *в* – релаксированный дислокационный рост

гут быть адаптированы за счет упругих напряжений, то есть за счет деформации решетки таким образом, что напряженная решетка приобретает периодичность подложки в плоскости границы раздела, но может иметь иной период в перпендикулярном направлении, чтобы сохранить объем элементарной ячейки. Этот тип роста, называемый *псевдоморфным*, показан на рис. 13.24, б. При больших несоответствиях решеток напряжения релаксируются за счет образования на границе раздела *дислокаций несоответствия*, как показано на рис. 13.24, в. Можно видеть, что расстояние между дислокациями равно

$$d = \frac{ab}{|b - a|} \quad d = b/\varepsilon \quad (13.17)$$

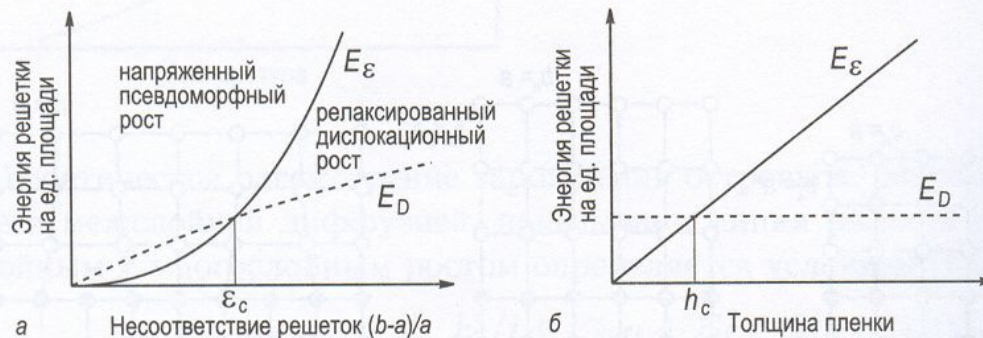


Какой механизм роста в действительности осуществляется в каждом конкретном случае, определяется соотношением удельной свободной энергии, связанной только с напряжением ( $E_\varepsilon$ ) и только с дислокациями ( $E_D$ ). Общая энергетика, стоящая за переходом от псевдоморфного к релаксированному росту, качественно проиллюстрирована на рис. 13.25. Рисунок 13.25, *а* показывает, что зависимости энергии от несоответствия решеток для напряженных пленок и пленок с дислокациями пересекаются при определенном критическом значении несоответствия  $\varepsilon_c$ . Ниже этого значения чисто напряженные пленки энергетически более выгодны, чем пленки с дислокациями, а выше его становится более выгодно образование дислокаций. Рисунок 13.25, *б* иллюстрирует влияние толщины пленок. Энергия, связанная с напряжением пленки, растет с толщиной пленки, тогда как энергия, обусловленная наличием дислокаций, остается практически постоянной. Пересечение графиков дает критическую толщину  $h_c$ , при кото-

$$E_\varepsilon \sim \varepsilon^2$$

$$E_D \sim \varepsilon$$

$$E_D \sim N \sim 1/d \sim \varepsilon$$

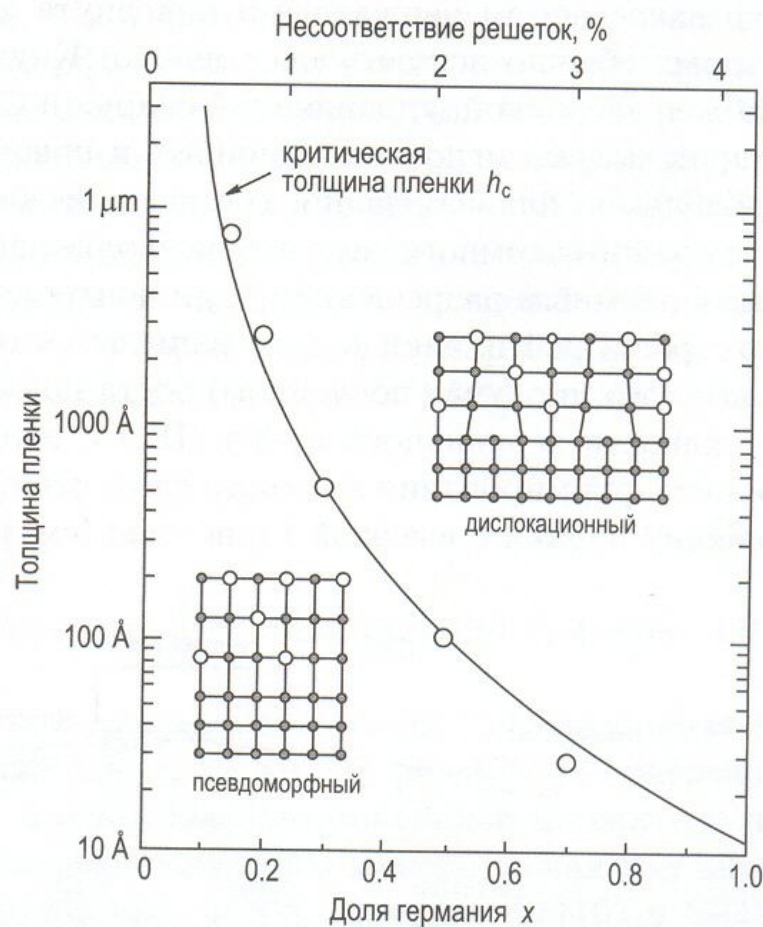


**13.25.** Схематические графики зависимости энергии решетки на единицу площади, запасенной на границе раздела пленка/подложка,

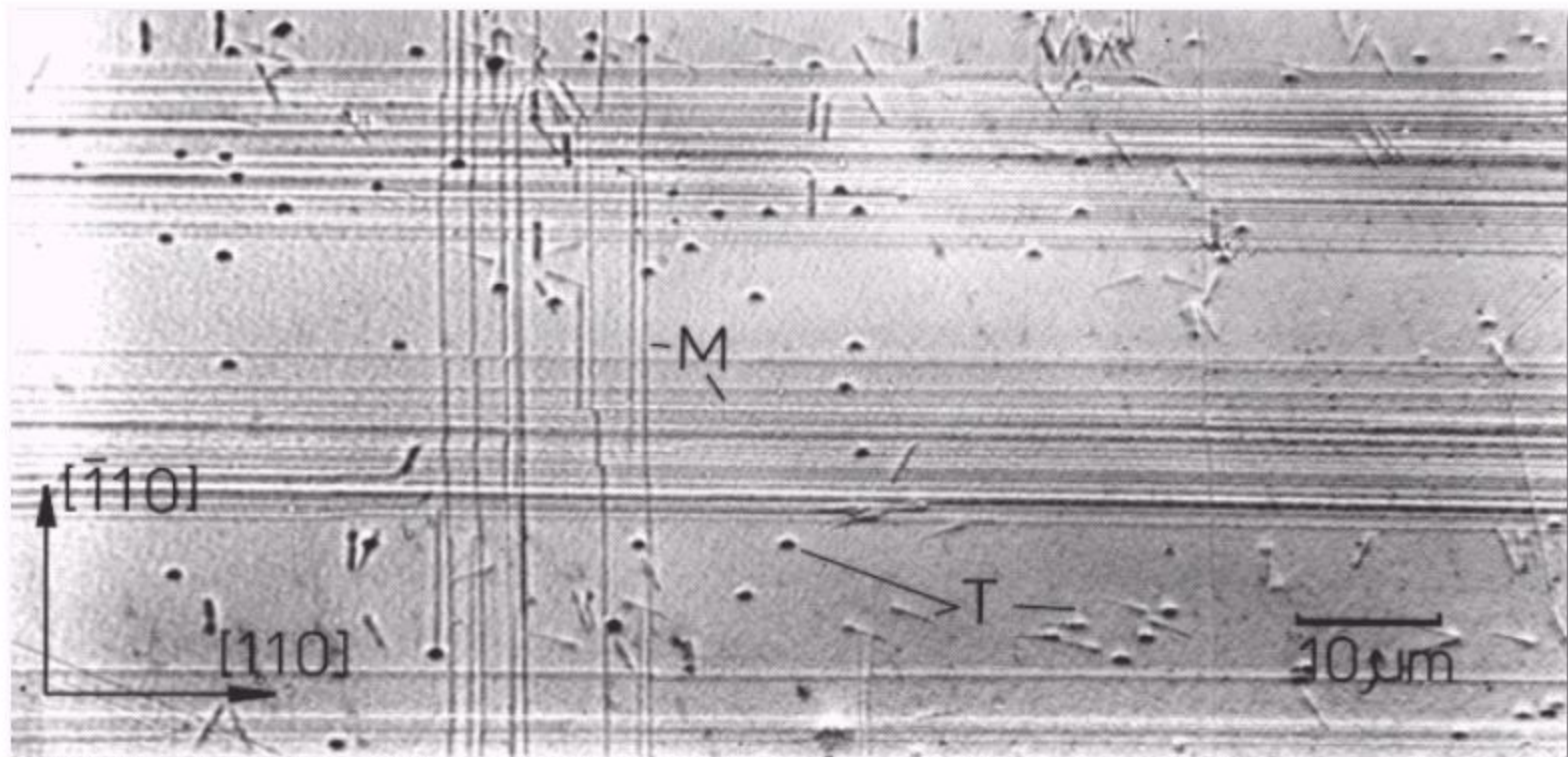
*а* – от несоответствия решеток; *б* – от толщины пленки. Ниже критического несоответствия  $\varepsilon_c$  и ниже критической толщины пленки  $h_c$  напряженный псевдоморфный рост энергетически более выгоден, чем релаксированный дислокационный рост

рой происходит переход от псевдоморфного к дислокационному релаксированному росту. Как можно видеть на рис. 13.26, критическая толщина меняется на несколько порядков величины при изменении несоответствия решеток от долей процента до нескольких процентов. Показанный пример относится к росту пленок соединения  $Ge_xSi_{1-x}$  на подложке Si(100). В этом случае несоответствие контролируется долей  $x$  атомов Ge.

**Рис. 13.26.** Переход между напряженным псевдоморфным ростом и релаксированным дислокационным ростом для пленки сплава  $Ge_xSi_{1-x}$  на подложке Si(100). Граница дает критическую толщину пленки как функцию несоответствия решеток, которая определяется долей  $x$  атомов Ge в пленке [13.16]



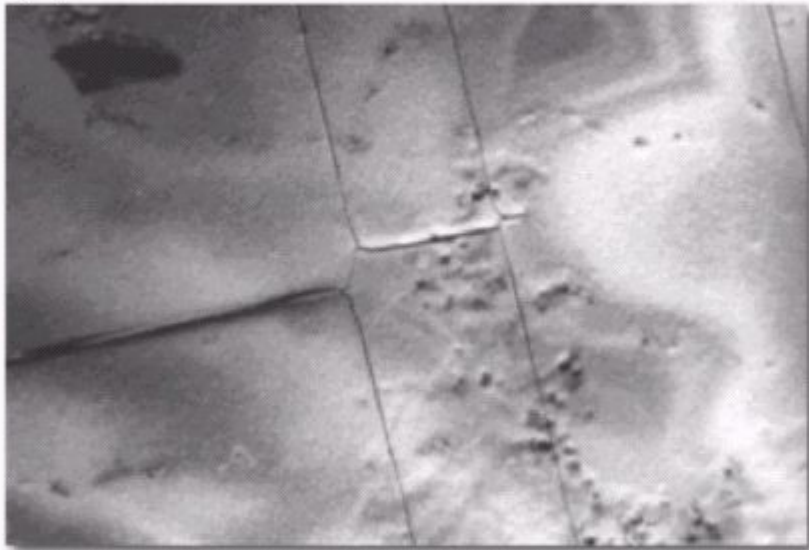
## Etched misfit dislocations



Etched misfit dislocations in epitaxial GaAs<sub>0.62</sub>P<sub>0.38</sub>/GaAs  
(T – threading dislocations, M – misfit dislocations in the (001) plane)

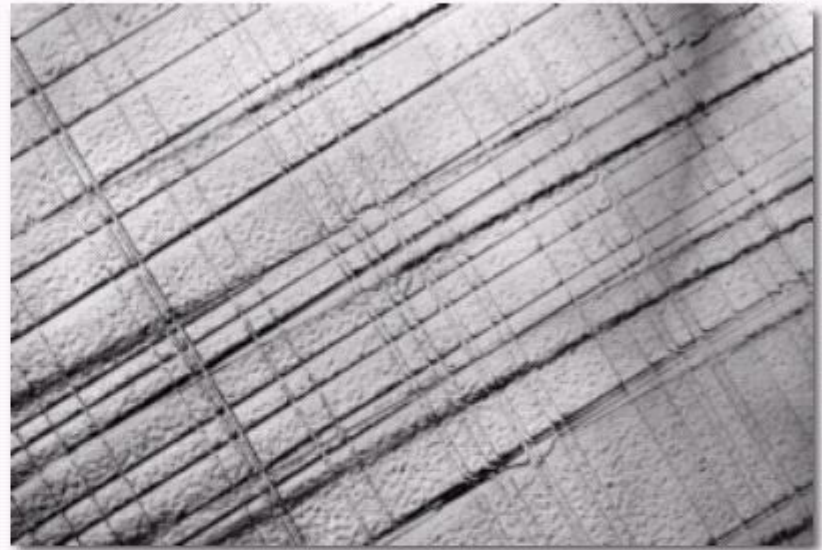
# TEM of misfit dislocations

(a)



1  $\mu\text{m}$

(b)



1  $\mu\text{m}$

(220) bright field images of misfit dislocations in epitaxial  $\text{GaAs}_{0.92}\text{P}_{0.08}/\text{GaAs}$ .

(a) Interface region layer/substrate,

(b) surface region.

*Механизмы размножения  
дислокаций*

## Механизмы размножения дислокаций

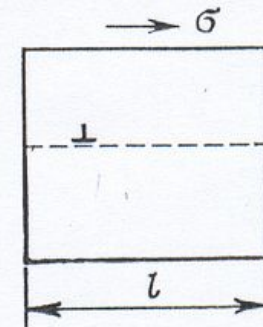
Хотя дислокации и не являются, подобно точечным дефектам, равновесными образованиями, практически любой кристалл содержит значительную длину дислокаций (при  $\rho = 10^8 \text{ см}^{-2}$  в  $1 \text{ мм}^3$  содержится 1 км дислокационных линий!). Дислокации возникают во время затвердевания расплава и при росте кристалла из газообразной фазы или из раствора. Поскольку под действием внешнего напряжения дислокации приходят в движение, вызывая пластическую деформацию, то, казалось бы, даже кратковременного приложения нагрузки, превышающей предел текучести, достаточно, чтобы все дислокации вышли на поверхность и кристалл стал бездислокационным. Между тем, опыт показывает, что во время пластической деформации плотность дислокаций не только не падает, а значительно возрастает. Следовательно, в кристалле действуют механизмы размножения дислокаций. Особенно эффективными являются источники Франка—Рида и двойное поперечное скольжение.

# Сила, действующая на единицу длины дислокации

Для нахождения силы, действующей на единицу длины прямолинейной дислокации в кристалле под однородным напряжением, вычислим работу, произведенную внешней силой при перемещении дислокации длины  $L=1$  через кристалл толщиной  $l$  (рис. 28). С одной стороны, эта работа равна силе  $\sigma Ll$ , умноженной на длину  $b$  пластического сдвига при прохождении одной дислокации, с другой стороны, она равна произведению искомой силы  $f$  на длину  $l$  пути дислокации. Приравнявая оба выражения, получаем  $\sigma Ll b = fl$  или

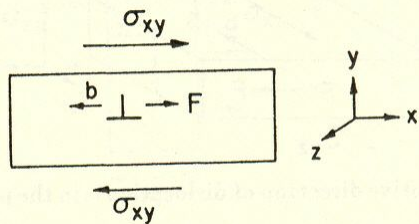
$$f = \sigma b L = \sigma b. \quad (16.1)$$

В общем случае следует учесть, что деформированное состояние кристалла может быть сложным, а направление силы не обязательно совпадает с направлением вектора Бюргерса. Тогда формула (16.1) заменится формулой Пича — Келлера для механической силы, действующей на элемент длины дис-



28. К вычислению силы, действующей на дислокацию

Сила Пича - Келлера



$$G_j = b_i \sigma_{ij}$$

вектор

Сила всегда направлена перпендикулярно линии дислокации

$$F = (b\sigma) \times t, \quad (8.22)$$

начальная касательная к линии. В этом уравнении  $b$  действует на первый индекс тензора  $\sigma$ , т. е.  $(b\sigma)_i = b_j \sigma_{ji}$ , как в (8.21). Это замечание

# Линейное натяжение дислокаций

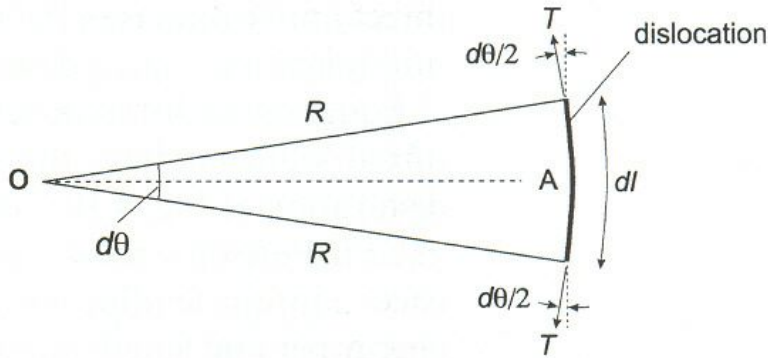


Figure 4.10 Curved element of dislocation under line tension forces  $T$ .

In addition to the force due to an externally applied stress, a dislocation has a *line tension* which is analogous to the surface tension of a soap bubble or a liquid. This arises because, as outlined in the previous section, the strain energy of a dislocation is proportional to its length and an increase in length results in an increase in energy. The line tension has units of energy per unit length. From the approximation used in equation (4.24), the line tension, which may be defined as *the increase in energy per unit increase in the length of a dislocation line*, will be

$$T = \alpha Gb^2 \quad (4.28)$$

$$E_e / L = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0}$$

$$E_{el} / L \approx Gb^2$$

Сила, действующая на концы линии

Линейное натяжение стремится уменьшить длину дислокационной линии



## *Изгиб линии дислокации*

*Таким образом, для того, чтобы изогнуть дислокацию в кривую с эффективным радиусом  $R$ , необходимо приложить к образцу напряжение:*

$$\sigma = Gb/R$$

$$R = Gb/\sigma$$

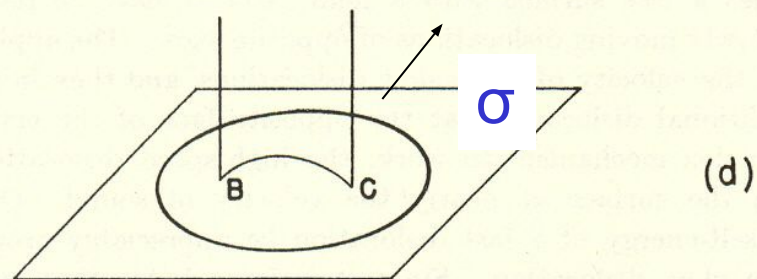
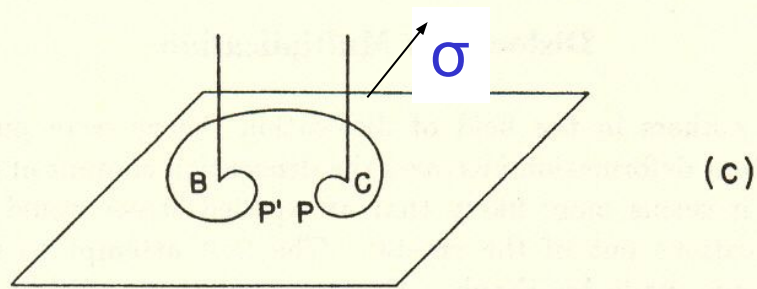
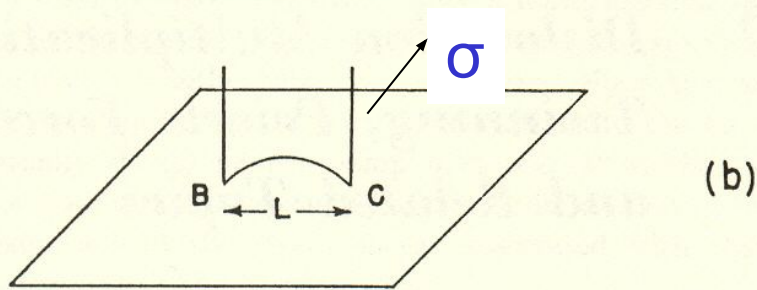
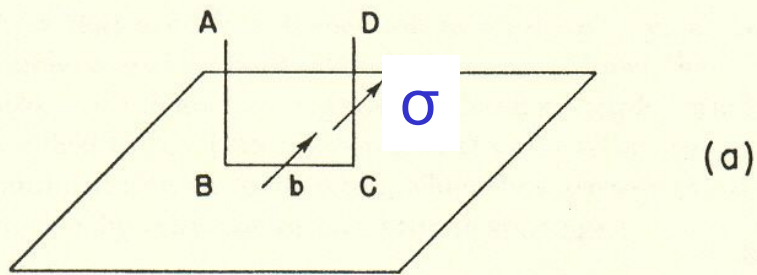
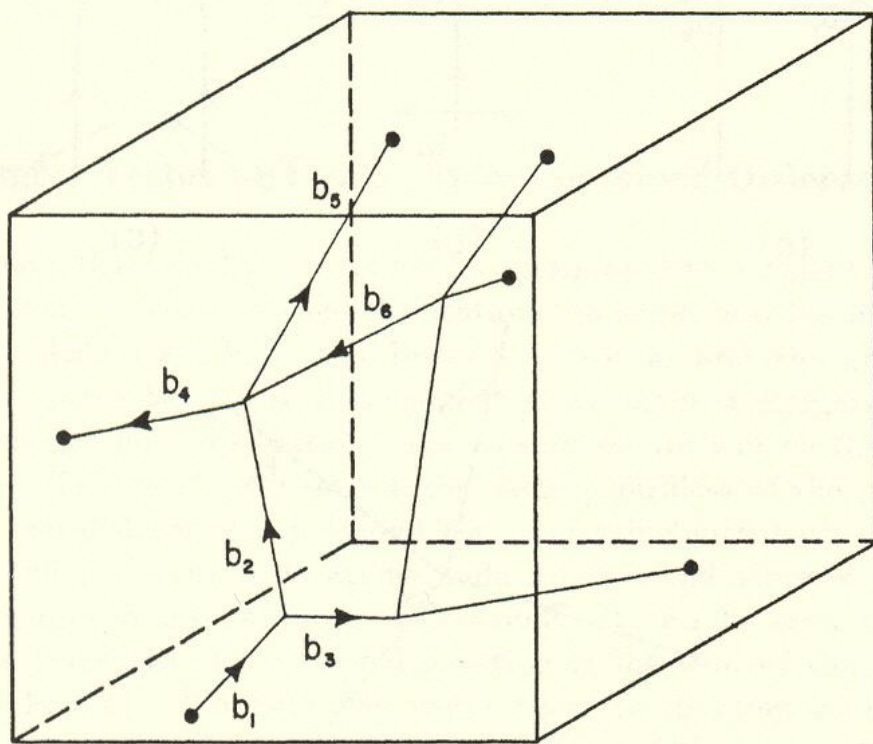


FIGURE 5-1. Frank-Read source.

*Источник  
Франка - Рида*

*процесс повторяется  
много раз*

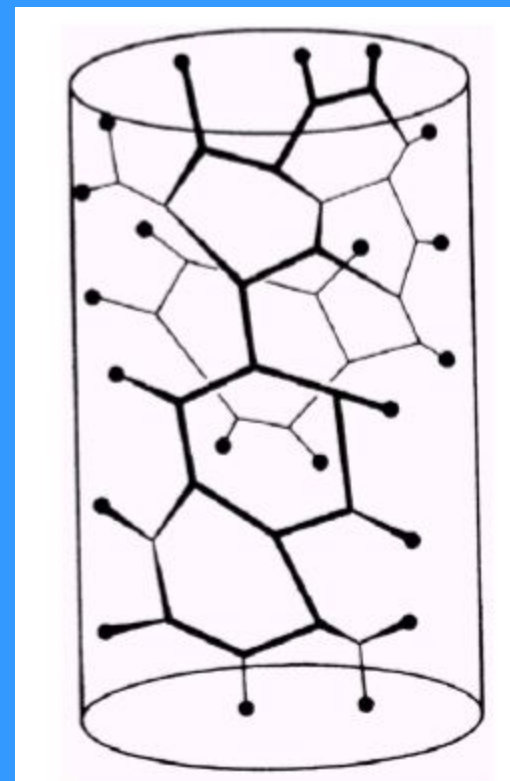
# Дислокационная сетка (сетка Франка)



$$b_1 = b_2 + b_3$$

$$b_2 + b_6 = b_4 + b_5$$

FIGURE 4-2. Dislocation nodes.



## Механизм Франка – Рида

Рассмотрим прямолинейный сегмент дислокации  $AB$  длины  $2\ell$ , закрепленный в точках  $A$  и  $B$  ( $A$  и  $B$ , которые могут быть местами нахождения примесей, преципитатов, пересечений с другими дислокациями и т. д. (рис. 8.10, позиция (a)). Сегмент легко движется в своей плоскости скольжения под действием силы Пича – Келера  $F = \sigma b$  на единицу длины. Сегмент принимает равновесный радиус  $\rho = \frac{\mu b}{\sigma}$   $\mu \equiv G$

Начнем с малого  $\sigma$ . Для  $\sigma = 0$  имеем:  $\rho^{-1} = 0$ . Радиус кривизны поначалу уменьшается при возрастании  $\sigma$  до значения

$$\rho_c = \frac{\ell}{2} = \frac{\mu b}{\sigma_c},$$

$$\sigma_c \approx \mu b / \ell$$

достигаемого при  $\sigma_c = 2\mu b / \ell$  (рис. 8.10, позиция (c)). Вследствие закрепления радиус кривизны не может уменьшаться, но он не может и увеличиваться, так как бóльшее значение радиуса соответствует меньшим значениям напряжения  $\sigma < \sigma_c$ . Следовательно, положение  $\sigma = \sigma_c$ ,  $\rho = \ell / 2$  нестабильно и длина дислокации спонтанно увеличивается до новой позиции (d), где сегменты противоположных знаков (по-прежнему принадлежащие той же дислокации) сближаются и, следовательно, сильно при-

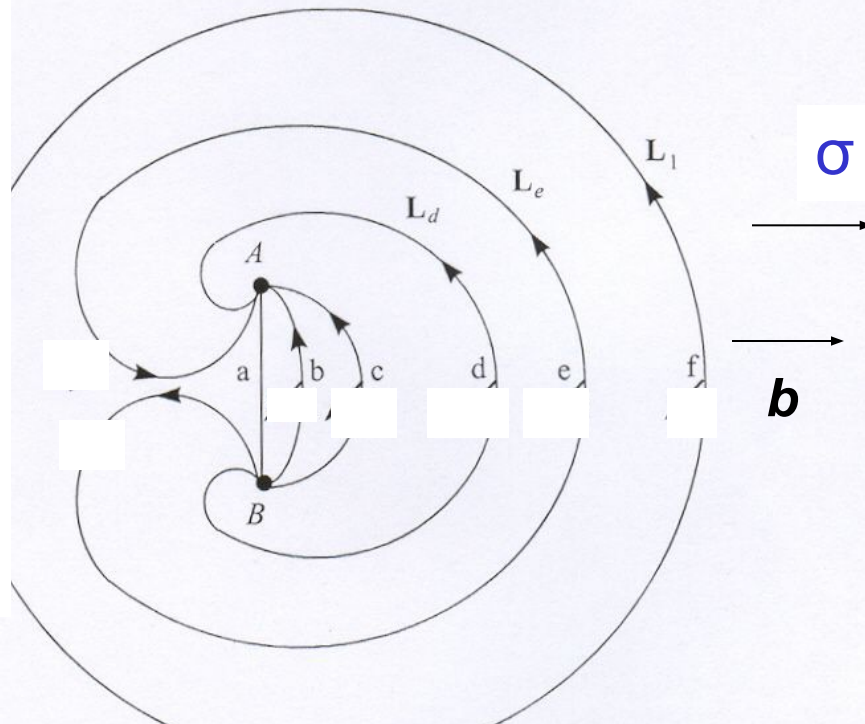
тягивают друг друга (позиция (e)). Этот процесс приводит к образованию петли  $L_1$ , оторвавшейся от сегмента АВ, (позиция (f)). Сегмент восстанавливается и растет снова, выталкивая петлю  $L_1$ , поскольку она является дислокацией того же знака. Работа механизма повторяется, давая последовательность петель  $L_1, L_2 \dots$  до момента, когда их суммарные напряжения не погасят приложенное напряжение до уровня ниже критического, равного  $\sigma_c$ . Заметим, что  $\sigma_c \sim \mu b/l$  мало в хорошо отожженном материале, в котором мало дислокации и мало точек закрепления. Принимая  $l \sim 10^{-6}$  м,  $b \sim 10^{-9}$  м, получаем:  $\sigma_c \sim 10^{-3}\mu$ . Однако  $\sigma_c$  должно быть больше, чем напряжение Пайерлса  $\sigma_{\text{П}}$ , которое возникает вследствие противодействия движению со стороны решетки (см. анализ  $\sigma_p$  ниже).

*Критическое напряжение, при котором работает источник*

$$\sigma_c \approx \mu b/l$$

$$\sigma_c \approx 10^{-3}\mu$$

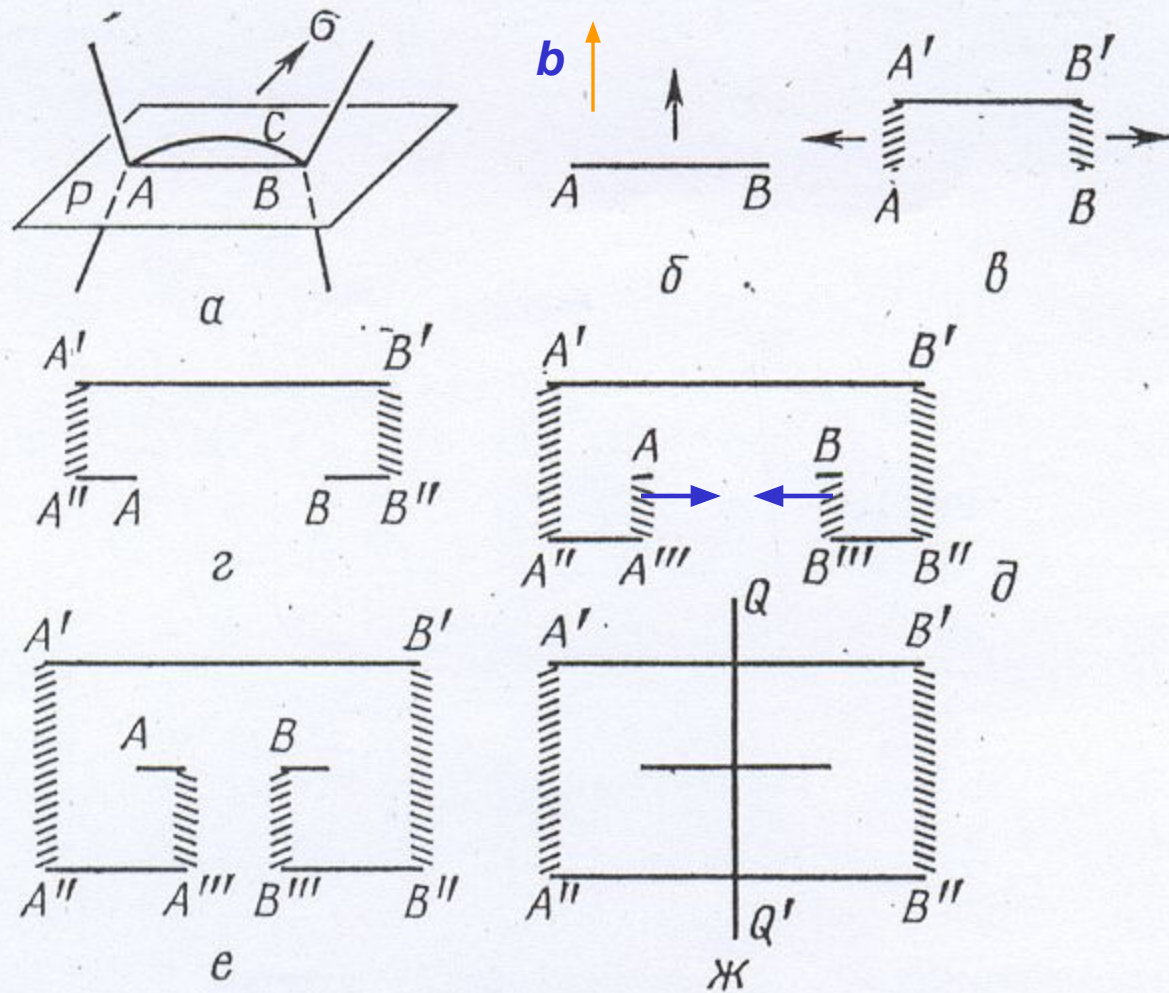
$$\sigma_c \geq \sigma_p$$



*Механизм Франка - Рида. Стрелки показывают направление обхода линии дислокации;  $\mathbf{b}$  - вектор Бюргерса.*

Источник Франка — Рида. Рассмотрим для определенности отрезок краевой дислокации с плоскостью скольжения  $P$  (рис. 35), закрепленный в точках  $A$  и  $B$ , например в узлах дислокационной сетки. Под действием касательного напряжения  $\sigma$  он выгибается в дугу  $ACB$ , так что дислокация приобретает винтовую компоненту и на большей длине превращается в смешанную. Схематически это представлено на рис. 35, б—ж, из которого видно, что перемещающийся отрезок краевой дислокации  $AB$  тянет за собой по краям винтовые «вожжи» — две разноименные винтовые дислокации. Как следует из формулы Пича — Келера (16.2), приложенное напряжение  $\sigma$  действует на эти винтовые отрезки силами, направлен-

ными по нормали к ним в противоположные стороны. Под действием этих сил отрезки  $AA'$  и  $BB'$  расходятся в разные стороны, причем краевой отрезок  $A'B'$  удлиняется, а от точек закрепления  $A$  и  $B$  отходят новые краевые отрезки  $AA''$  и  $BB''$ , разноименные по отношению к отрезку  $A'B'$ . Поэтому под действием напряжения  $\sigma$  они



35. Прогибание дислокации, закрепленной в точках  $A, B$ , под действием приложенного напряжения ( $a$ ), схема последовательных стадий работы источника Франка—Рида ( $b—ж$ ):

— краевые отрезки, — — — винтовые. Направление штрихов отвечает разным знакам дислокаций

удаляются от отрезка  $A'B'$  и тянут за собой винтовые «вожжи»  $AA'''$  и  $BB'''$ . Под действием  $\sigma$  и собственного притяжения разноименные отрезки  $AA'''$  и  $BB'''$  притягиваются и аннигилируют. При этом образуется сплошной краевой отрезок  $A''B''$  и восстанавливается исходный отрезок-источник  $AB$ . В результате рассмотренного цикла образовалась замкнутая дислокационная петля  $A'B'V''A''$  и восстановился источник  $AB$ , способный испустить следующую петлю. На опыте и при более корректном учете линейного натяжения дислокаций форма дислокационных отрезков и петель оказывается криволинейной, а дислокации — смешанными. Однако это не меняет принципа действия самовоспроизводящегося источника.



Простая оценка напряжения  $\sigma_s$ , при котором работает источник, получается из условия баланса сил, действующих на прогнутый дислокационный сегмент  $AB$  с радиусом кривизны  $R$ . Сила линейного натяжения, препятствующая прогибанию дислокации, равна  $U/R$  и максимальна при  $R=L/2$ . Сила, с которой приложенное напряжение действует на дислокацию, равна согласно (16.1)  $\alpha\sigma b$ , где  $\alpha \leq 1$  — ориентационный множитель. Подставляя в равенство  $\sigma b = U/R$  выражения  $U \approx Gb^2$ , а также  $R=L/2$ , получаем с точностью до множителя порядка 1:

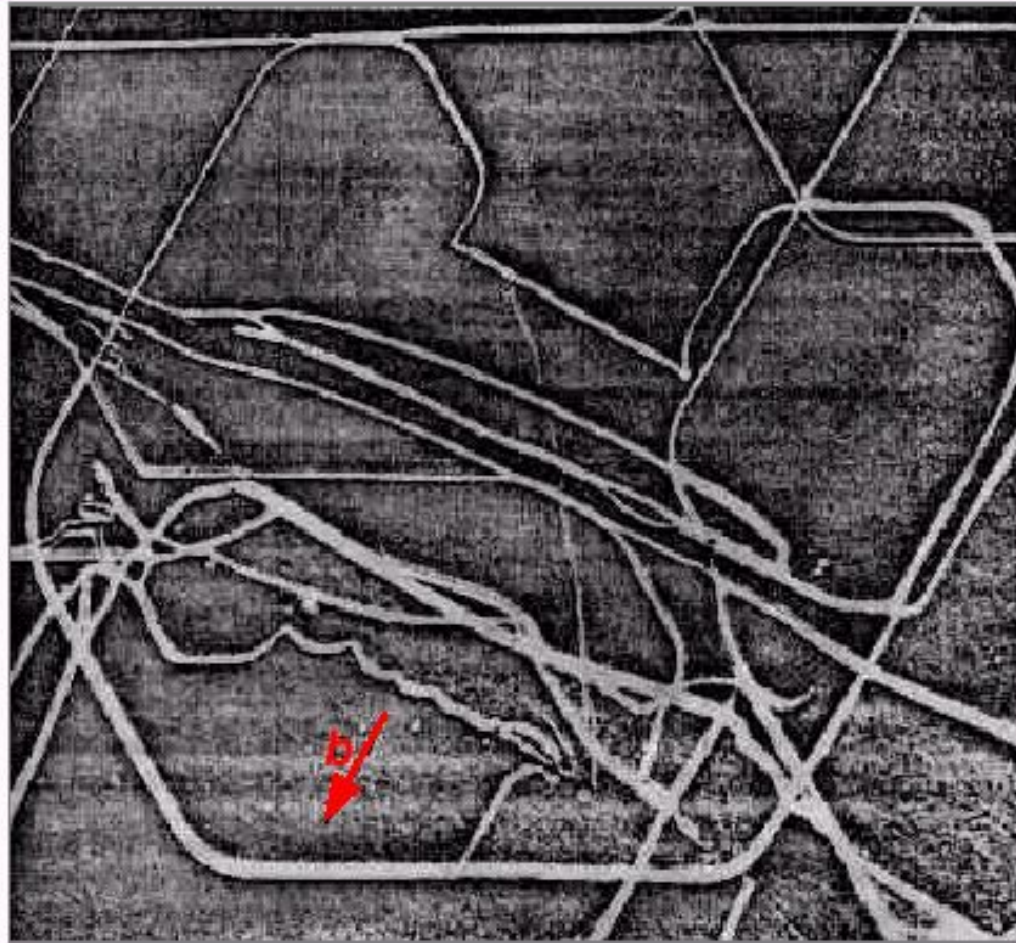
$$\sigma_s = Gb/L. \quad (19.1)$$

Испущенная источником петля создает в месте нахождения источника напряжение  $\sigma_i$ , противоположное по знаку напряжению  $\sigma$ . Пока петля не расширилась настолько, что  $\sigma_i < \sigma_s$  следующая петля не может быть испущена. Если испущенные петли останавливаются на различных препятствиях на конечных расстояниях от источника, то они в конце концов создают встречное напряжение  $\sigma_i > \sigma_s$  и источник блокируется (запирается).

Работающие источники Франка — Рида наблюдались неоднократно в трансмиссионном электронном микроскопе и снимались на киноплёнку. Полное число петель, испущенных источником, редко превышает 20.



# Dislocation multiplication in plastically deformed silicon



TEM weak-beam image of dislocations in deformed silicon. The length of the Frank–Read source amounts to 2  $\mu\text{m}$ .

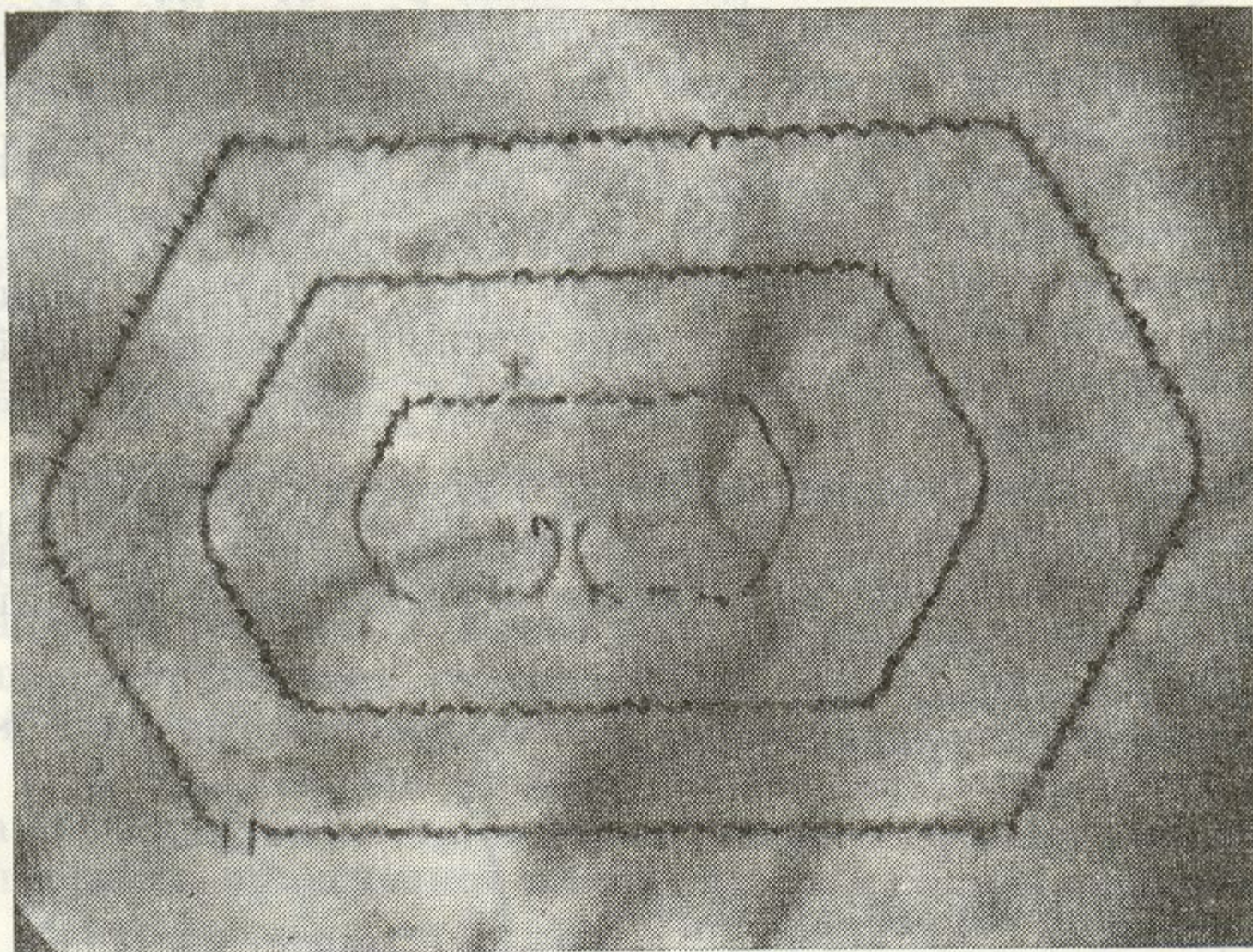
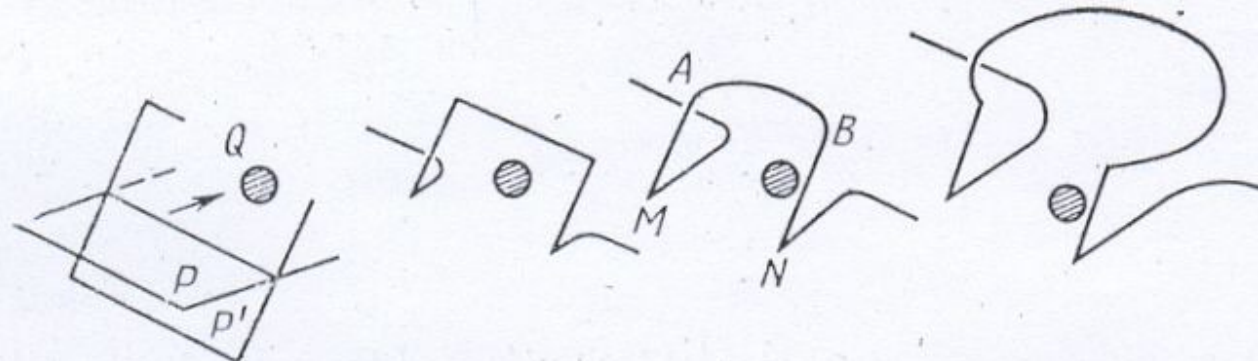


Рис. 20.2. Источник Франка—Рида в кремнии, декорированном медью [7].

## Другие источники дислокаций



36. Двойное поперечное скольжение винтовой дислокации, обходящей препятствие  $Q$

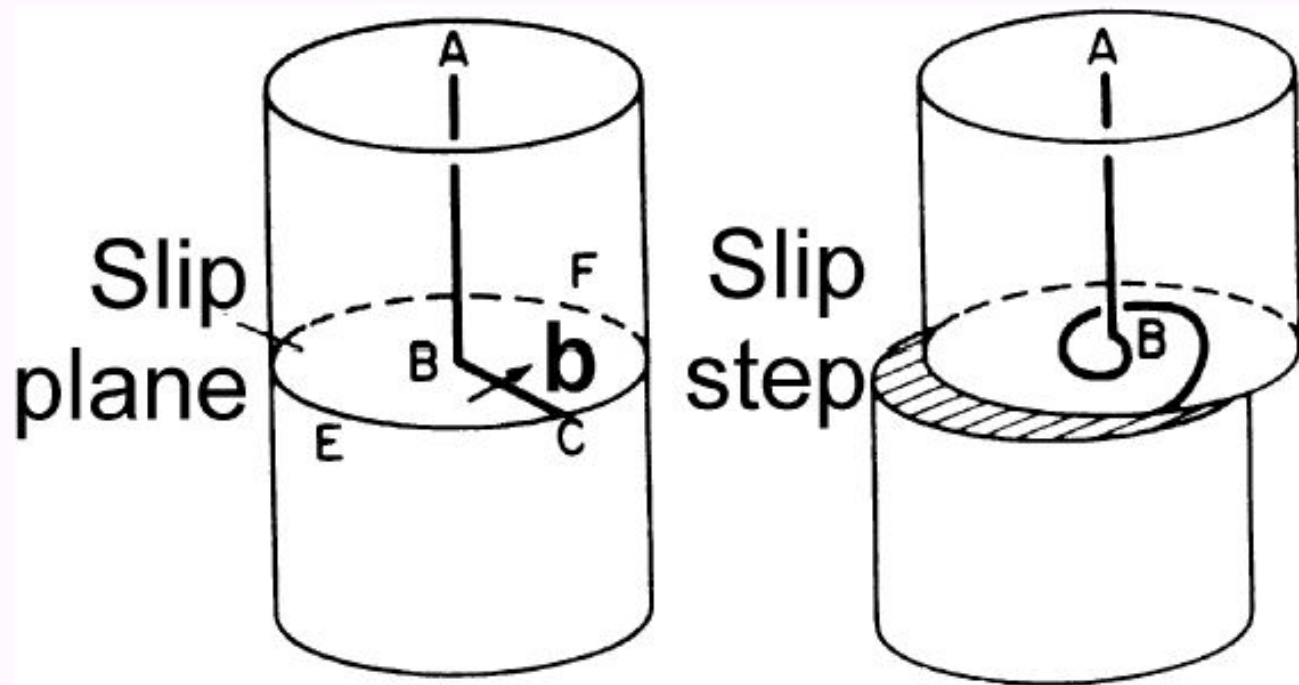
**Двойное поперечное скольжение.** Концами отрезка, работающего в качестве источника Франка—Рида, могут быть не только узлы дислокационной сетки. Другой тип точек закрепления возникает, когда отрезок винтовой дислокации, движущейся в плоскости скольжения  $P$  (рис. 36), переходит в другую плоскость скольжения  $P'$ , проходит в ней некоторое расстояние, а затем снова меняет плоскость скольжения и продолжает движение в

плоскости, параллельной  $P$ . Такое явление называется двойным поперечным скольжением. Причиной этому могут быть локальные неоднородности поля внутренних напряжений, вызванные, например, другими дислокациями или упругими включениями, в результате чего касательное напряжение в плоскости  $P'$  оказывается в некоторой области выше, чем в плоскости  $P$ . Отрезки  $MA$  и  $NB$  («вожжи») краевой или смешанной ориентации располагаются в участках, где действующее на них локальное напряжение меньше силы трения решетки, и поэтому неподвижны, так что точки  $A$  и  $B$  представляют собой неподвижные точки закрепления винтового отрезка  $AB$ , способного работать как источник Франка—Рида, если его длина удовлетворяет условию (19.1). Таким образом двойное поперечное скольжение приводит к образованию источников дислокаций. Обычно при этом испускается не более 1—2 петель, поскольку винтовые участки расширяющейся петли могут вновь совершить поперечное скольжение.

Полюсные источники. Критическое напряжение  $\sigma_s$  источника Франка—Рида сильно снижается, если дислокационный отрезок закреплен только в одной точке, а другим концом выходит на поверхность кристалла. Легко убедиться, что такой однополюсный источник также способен испускать дислокационные петли (точнее, полупетли), если себе представить, что на рис. 37 плоскость симметрии источника  $QQ'$  есть поверхность кристалла. Низкое значение  $\sigma_s$  объясняется тем, что в балансе энергии источника  $W_1 = W_2$  работа внешних сил  $W_2$  уменьшается вдвое, ибо площадь сдвига вдвое меньше, а упругая энергия  $W_1$  снижается благодаря действию сил изображения.

Итак, мы видим, что под действием напряжения, превышающего  $\sigma_s = Gb/L$ , где  $L$  — некоторый характерный элемент длины дислокационной структуры кристалла, происходит не только перемещение дислокаций, но и интенсивное их размножение.

# Single-ended Frank-Read source

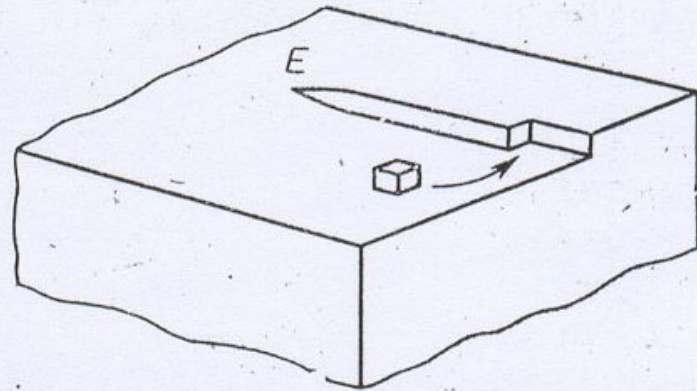


[Hull, Bacon 1992]

- The segment AB is not glissile, but the segment BC can move in the slip plane
- Process is regenerative,  $n$  revolutions produce a displacement of  $nb$
- Spiraling results in an increase of the total length of the dislocation line

**Образование дислокаций при росте кристаллов.** Если кристалл растет из расплава, вблизи фронта кристаллизации имеется изменяющееся со временем температурное поле  $T(r, t)$  сложной конфигурации, которая зависит от геометрии растущего кристалла, его перемещений во время роста и условий теплоотвода. Это приводит к возникновению температурных напряжений, обычно превышающих критическое напряжение  $\sigma_s$  размножения дислокаций. Вблизи температуры плавления  $\sigma_s$  особенно мало, поскольку тепловые флуктуации облегчают движение дислокаций, а модули упругости низки. Например, для хрупких при комнатной температуре кристаллов кремния и германия  $\sigma_s$  оценивается в 60—90 и 15 г/мм<sup>2</sup> (0,6—0,9 и 0,15 Н/мм<sup>2</sup>). Первичными дислокациями, которые служат источниками Франка — Рида, являются обычно участки призматических дислокационных петель, возникающих в результате коалесценции избыточных вакансий (в кремнии — межузельных атомов), концентрация которых высока вблизи температуры плавления.

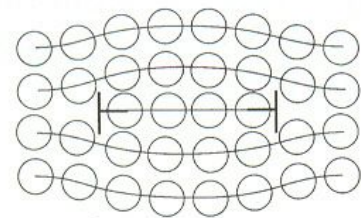
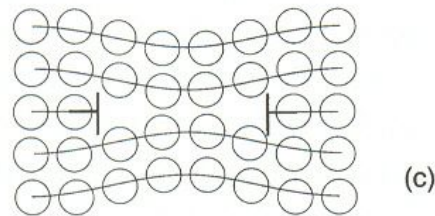
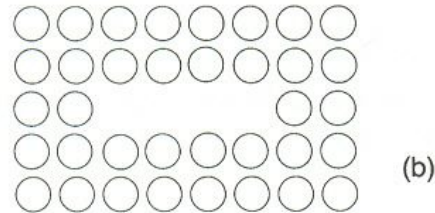
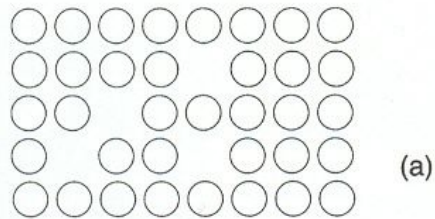
$$\sigma_s \approx 10^6 \text{ Н/м}^2$$



38. Механизм роста кристалла за счет присоединения атомов к ступеньке, оканчивающейся в точке выхода  $E$  винтовой дислокации на поверхность кристалла



## Призматические дислокации



**Figure 3.18** Formation of a prismatic dislocation loop. (a) Represents a crystal with a large non-equilibrium concentration of vacancies. In (b) the vacancies have collected on a close-packed plane and in (c) the disc has

must be occurring.

Numerous examples of prismatic loops have been observed using transmission electron microscopy. They can be formed in the following way. The supersaturation (excess concentration) of vacancies resulting either from rapid quenching from a high temperature (see section 1.3) or from atomic displacements produced by irradiation with energetic particles may precipitate out in the form of a disc on a close-packed plane. If the disc is large enough, it is energetically favourable for it to collapse to produce a dislocation loop (Fig. 3.18). The Burgers vector of the loop is normal to the plane of the loop, so that an edge dislocation has been formed. In the presence of an excess concentration of vacancies the loop will expand by positive climb. Alternatively, at high temperature when the equilibrium concentration of vacancies in the lattice is large (section 1.3) or if there is a nearby sink for vacancies the loop will emit vacancies and shrink by negative climb. Figure 3.19 shows an example of the

*Если образуется диск достаточно большого размера, то ему энергетически выгодно деформироваться с образованием дислокационной петли*

# Образование дислокаций при росте кристаллов из расплава

*Процессы идут в следующей последовательности:*

- 1. Образование большого количества равновесных вакансий вблизи температуры плавления.*
- 2. Коалесценция избыточных вакансий в областях кристалла, где температура понижена относительно средней вследствие температурных градиентов. Дальнейшее образование призматических дислокационных петель – первичные дислокации.*
- 3. Первичные дислокации являются источниками Франка-Рида и происходит размножение дислокаций под действием температурных напряжений, превышающих критические напряжения размножений дислокаций  $\sigma_c$ .*

Чтобы получить из расплава бездислокационные кристаллы, не содержащие в макроскопических объемах ни одной дислокации, необходимо выполнение весьма жестких условий, обеспечивающих отсутствие температурных напряжений и дислокаций в затравочном кристалле.

Если же кристалл растет из раствора или из пара путем осаждения атомов на подложке из того же или другого (эпитаксиальный рост) материала, выходящие на поверхность подложки дислокации продолжают расти в наращиваемых слоях. Особо важную роль играют при этом винтовые дислокации, поскольку в точке выхода винтовой дислокации неизбежно обрывается ступенька на поверхности кристалла, к которой легко присоединяются атомы, осевшие на поверхность растущей грани (рис. 38).