

武 汉 大 学

国 庆 三 十 周 年 学 术 报 告 会
论 文 摘 要

(物 理 部 分)

科 学 研 究 处

一 九 七 九 年 十 二 月

目 录

体心立方金属的低温形变机制.....	周如松 (1)
双轴拉伸下随机取向分布园裂纹对脆性破坏的统计影响.....	田德诚 (2)
两种镍铁基非晶态合金的稳定性和结晶特性.....	黄胜涛 唐承欢 (4)
铜单晶的不连续屈服.....	王子孝 (7)
冷加工含氮铁合金的低频内耗.....	周如松 施肇光 (8)
不同取向深埋椭圆裂缝的扩展.....	田德诚 朱家驹 (9)
用衍射仪测定镀锌层组织的简易方法.....	魏铭鑑 孟锡明 (11)
离子注入硅太阳能电池.....	邱万川 徐在贵 李金钗 潘显政 (12)
用红外付里叶光谱研究半导体中的杂质.....	叶亦英 (13)
大角度晶界结构模型与 0 点阵理论.....	王子孝 胡昌霖 (15)
拉格伦日运动方程对计算约束及作用的应用.....	熊吟涛 (17)
激光辐射对钢板表面的热效应.....	梁家宝 (18)
强噪声背景下的弱信号检测.....	方志豪 (20)
F E T 噪声特性的分析.....	方志豪 (21)
电子量的绝对测量.....	胡修愚 (22)
核幅射探测用的低噪音前置放大器的设计.....	雷雄鸣 (25)
硅光敏管光谱响应的择优设计考虑.....	尹长松 (27)
光敏三极管时间参数的瞬态分析.....	何民才 赵小敏 (28)
宽光谱硅光敏管.....	张烽生等 (30)
集成双光敏管.....	陈云金 赵小敏等 (32)
硅雪崩光电二极管体内漏电流的测量分析.....	石仲斌 (35)
稳压管小电流稳压性能的改善.....	张君和 (36)
正电子湮没方法及应用.....	王少阶 李世清 (38)
射极跟随器稳定性的计算.....	姚新民 (40)
用超声击碎人体内结石.....	张沪生 (43)

体心立方金属的低温形变机制

周 如 松

晶体的范性形变是通过其中位错运动来实现的,因此它的基本问题自然就是确定晶体在外应力作用下其中位错运动的本质。60年代以前,关于金属范性形变本质的研究工作偏重于 fcc 和 hcp。60年代以来,研究 bcc 金属形变本质的兴趣迅速增长,其重要原因之一是制备高熔点金属单体的技术已经完善,随后发现低温形变时 bcc 的行为在许多方面都不同于 fcc 金属,主要的不同方面有:

1. 滑移及屈服强度的不对称,即是在给定取向的 bcc 单晶体中,拉伸和压缩形变时的滑移面不同,屈服应力大小也不同,即不遵守 Schmid 定律。在 fcc 金属中罕见这种不对称性。

2. 单晶体 bcc 金属不出现三阶段加工硬化现象,而 fcc 则有明确的三阶段加工硬化。

3. bcc 金属在绝对温度低于 $0.2T_m$ (T_m ——熔点) 时屈服应力随温度下降而突增, fcc 金属则没有这种突增。

4. bcc 金属固溶合金化可以强化,也可以弱化。fcc 金属的情形则总是强化。

本报告只介绍第一方面的问题,因为它属于滑移几何学问题,因此也是位错本身结构问题。在报告中就第一方面问题介绍了下面几点:

1. bcc 金属中存在的位错(电镜观察结果)及其所在结晶学面。从新考虑 bcc 晶体的滑移系统。

2. 用 $\phi \cdot x$ 曲线讨论 bcc 金属及合金的滑移不对称性的现象。

3. bcc 金属屈服不对称现象及其对 Schmid 定律的偏离。

4. bcc 金属中螺位错的分解模型。

5. 定性用位错分解模型说明 bcc 金属的滑移和屈服强度的不对称性。

双轴拉伸下随机取向分布园裂纹 对脆性破坏的统计影响

田 德 诚

实际材料内部存在着各种各样的缺陷(如疏松,脆性夹杂,微裂纹……等),其形状,大小、方位是随机的,本文研究了随机取向和大小的圆裂纹对双轴拉伸下脆性破坏的统计影响。

曾经对双轴拉伸下内部圆裂纹脆性扩展的临界载荷随取向的关系进行了计算^[1]。计算结果可用下式拟合:

$$\frac{\sigma_f a}{K_{Ic}} = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left\{ 1 + 3 \tan \left[\frac{2}{\pi^2} \left(\frac{\pi}{2} - \beta \right)^2 \left(\frac{\pi}{2} + \delta \right) \right] \right\} \quad (1)$$

σ_f 为临界破坏应力。 a 为圆半径, $\frac{\pi}{2} - \beta$ 为圆盘中心轴与 Z 轴的交角 ($\sigma_z = \sigma$, $\sigma_x = \frac{1}{2}\sigma$, $\sigma_y = 0$), δ 为圆盘平面与 $X-Y$ 平面的交线与 Y 轴所成的角。圆盘裂纹的取向可以用 β 和 δ 表示。

若圆裂纹的取向完全随机,具有不同方位的概率相等,而且裂纹的大小也是随机的,半径为 a 的概率密度 $f(a)$ 按照^[2] 近似为:

$$f(a) = \frac{c^{n-1}}{(n-2)!} a^{-n} e^{-\frac{c}{a}} \quad (2)$$

c, n 为与材料有关的常数,则由(1)式和(2)式,应力为 σ 时单个裂纹引起破坏的概率为

$$F(\sigma) = \iiint f(a) da d\beta d\delta$$

$$= \iiint \frac{4}{\pi^2} \cdot \frac{c^{n-1} a^{n-1} e^{-\frac{c}{a}}}{(n-2)!} da d\beta d\delta \quad (3)$$

$$\sigma^2 \geq \frac{K_{Ic}^2}{a} \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left\{ 1 + 3 \tan \left[\frac{2}{\pi^2} \left(\frac{\pi}{2} - \beta \right)^2 \left(\frac{\pi}{2} + \delta \right) \right] \right\}.$$

$$0 \leq \beta \leq \frac{\pi}{2}$$

$$-\pi \leq \delta \leq \pi$$

(3)式积分结果给出:

$$F(\sigma) = \frac{4(2-\sqrt{2})}{\sqrt{2\pi}(n-2)!} (cx)^{n-1} \cdot I \quad (4)$$

其中

$$x = \frac{4\sigma^2}{\pi^2 K_{1c}^2}, \quad I = H_0 + H_1(cx) + H_2(cx)^2 + \dots$$

$H_0, H_1, H_2, \dots$ 等为仅与 n 有关与应力 σ 无关的常数。若 $cx \ll 1$ 则 $F(\sigma) = A_0(cx)^{n-1} = B_0\sigma^{2n-2}$, A_0, B_0 为常数。

物体体积为 V , 含有 N 个裂纹。平均一个裂纹占有体积 V_0 , 则应力为 σ 的破坏概率 P_f 可由 $F(\sigma)$ 计算 ($N \gg 1$),

$$\begin{aligned} P_f(\sigma) &= 1 - [1 - F(\sigma)]^N = 1 - \exp[-NF(\sigma)] \\ &= 1 - \exp(-NB_0\sigma^{2n-2}) \\ &= 1 - \exp\left(-\frac{B_0}{V_0}V\sigma^{2n-2}\right) \end{aligned} \quad (5)$$

即: 双轴拉伸下, 物体破坏概率与比例载荷为负指数关系 (Weibull 分布), 且 Weibull 指数 $= 2n-2$ 。

对于薄壁高压圆筒, (5)式给出压力 p 时破坏概率:

$$P_f(p) = 1 - \exp[-C_0 p^{2n-2}]$$

其中 p 为内压, C_0 为常数。

参 考 文 献

- [1] 田德诚, 朱家驹: “全国高等院校断裂力学学术会议”(1979)交流资料
- [2] Polonietcki, J. D. Wilsnow, J. R. Nature. 229(1971), 226

两种铁镍基非晶态合金的稳定性和结晶特性

黄胜涛 唐承欢

非晶态合金在力学性能、磁性和其它物理性能以及耐腐蚀性能等方面都显示出优异特性。但非晶态是亚稳态，在一定条件下会转变为晶态或另一种非晶态。随着这种转变的发生，它的优异性能也会转变。故作为材料的非晶合金的结构和性能的稳定性问题是一个要重视的问题。

本文的目的是应用 x 射线衍射、电镜观察、显微硬度测量和示差热分析等方法研究两种软磁非晶合金 $\text{Fe}_{38}\text{Ni}_{30}\text{P}_{14}\text{B}_6\text{Al}_3$ 及 $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{15}\text{Si}_7\text{B}_{13}$ 的稳定性和结晶特性。现将结果扼要介绍如下：

表一 $\text{Fe}_{38}\text{Ni}_{30}\text{P}_{14}\text{B}_6\text{Al}_3$ 非晶态合金的结晶特性

结晶特性 热处理	相(一) (非晶态)	相(二)	相(三)	相(四)	备 注
380℃ 2小时 炉冷或水淬	非晶态	—	—	—	
390℃ 2小时 炉 冷	非晶态 多 量	微 量	—	—	相(二)的衍射花样线条少而模糊，不能确定相的性质
393℃ 2小时 炉冷或水淬	非晶态 少量	体心立方 $a = 2.87 \text{ \AA}$	体心四方 Fe_3P 型结构 $(\text{Fe}, \text{Ni})_3(\text{B}, \text{P})$	—	相(二)是溶有少量 Al 的铁固溶体
400℃ 2小时 炉冷或水淬	—	体心立方 $a = 2.87 \text{ \AA}$ 多 量	体心四方 Fe_3P 型结构 $a = 8.964 \text{ \AA}$ $c = 4.404 \text{ \AA}$ $(\text{Fe}, \text{Ni})_3(\text{P}, \text{B})$ 较 多 量	面心立方 $a = 3.586 \text{ \AA}$ 少 量	相(二)是溶有少量 Al 的 Fe 固溶体 相(四)是 Fe 溶于 Ni 的固溶体
600℃ 2小时 炉 冷	—	面心立方 Cr_{23}C_6 型结构 $a = 10.54 \text{ \AA}$ $(\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x})_{23}\text{B}_6$ 少 量	体心四方 Fe_3P 型结构 $a = 8.964 \text{ \AA}$ $c = 4.404 \text{ \AA}$ $(\text{Fe}, \text{Ni})_3(\text{P}, \text{B})$ 较 多 量	面心立方 $a = 3.579 \text{ \AA}$ 较多量	相(四)是 Fe 溶于 Ni 中的固溶体，可能还溶有 Al

一、结晶特性

用 x 射线衍射和电子衍射方法测定的二小时加热试样的结晶特性示于表一和表二。

由这两表可见,两小时加热的 $\text{Fe}_{38}\text{Ni}_{38}\text{P}_{14}\text{B}_6\text{Al}_4$ 和 $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{15}\text{Si}_7\text{B}_{13}$ 非晶态合金的起始结晶温度分别为 380°C 及 400°C , 完全晶化温度分别为 400°C 和 430°C 。我们认为后一合金稳定性较高的原因主要是 $\text{Fe}:\text{Ni}$ 含量比值较高。由表还可见, 这两个 Fe 、 Ni 基非晶合金向晶态转变时最早形成的相都是 A_2 构造(体心立方), 是 Fe 的固溶体。而两合金晶化产物之一 $(\text{Fe}, \text{Ni})_3(\text{P}, \text{B})$ 及 $(\text{Fe}, \text{Ni})_3\text{B}$ 是异质同构物, 都结晶成 Fe_3P 型结构。但 $(\text{Fe}, \text{Ni})_3\text{B}$ 是相亚脉相, 在较高温度下转变成 Fe_2B 相。

表二 $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{15}\text{Si}_7\text{B}_{13}$ 非晶态合金的结晶特性

结晶特性 热处理	相(一) (非晶态)	相(二)	相(三)	相(四)	备 注
400°C 2 小时 炉 冷	非晶态	—	—	—	
405°C 2 小时 炉 冷	非晶态		—	—	相(二)衍射线条隐约可见不能确定相的性质
	多 量	微 量			
415°C 2 小时 炉 冷	非晶态	体心立方 $a = 2.85 \text{ \AA}$	—	—	相(二)为溶有 Si 的 Fe 固溶体
430°C 2 小时 炉冷或水淬	—	体心立方 $a = 2.856 \text{ \AA}$	体心四方 Fe_3P 型结构 $a = 8.63 \text{ \AA}$ $c = 4.29 \text{ \AA}$ $(\text{Fe}, \text{Ni})_3\text{B}$	—	相(二)为溶有 Si 的 Fe 固溶体 相(三)高度弥散, 粒度小于 $100 \text{ \AA}$
600°C 2 小时 炉 冷	—	体心立方 $a = 2.860 \text{ \AA}$ 较少量	体心四方 $a = 5.099 \text{ \AA}$ $c = 4.240 \text{ \AA}$ Fe_2B 较多量	面心立方 $a = 3.579 \text{ \AA}$ 中等量	相(二)是溶有 Si 的 Fe 固溶体 相(四)是 Fe 溶于 Ni 的固溶体

试样由非晶态转变为晶态时性能随之改变。 $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{15}\text{Si}_7\text{B}_{13}$ 合金在转变时的显微硬度变化示于图 1。合金的晶化使显微硬度上升到超高硬的程度。

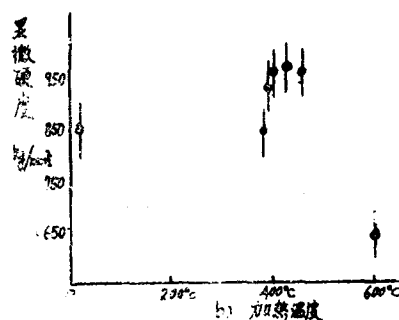


图1 $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{15}\text{Si}_7\text{B}_{13}$ 非晶态合金结晶过程中显微硬度的变化

二、非晶态下的结构弛豫谱

这两个非晶合金在非晶态下加热时，结构发生弛豫，原子重新排列。这在热分析曲线上表现得很明（图2）。

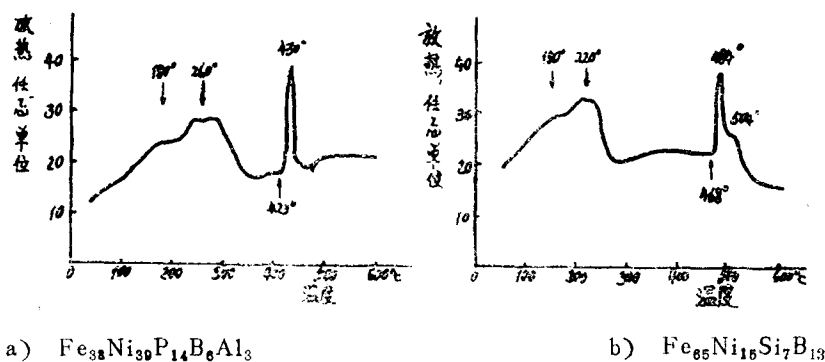


图2 示差热分析曲线（升温速度 $10^\circ\text{C}/\text{分}$ ）， Ar 气保护）

在图中， 430°C 、和 484°C 及 504°C 处的尖峰分别为两合金晶化时发生的放热反应产生的。在非晶态下（分别在 420°C 及 490°C 以下）两个合金都出现两次反应温度范围很宽的放热反应， $\text{Fe}_{38}\text{Ni}_{39}\text{P}_{14}\text{B}_6\text{Al}_3$ 反应峰发生在 180°C 和 260°C 处， $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{15}\text{Si}_7\text{B}_{13}$ 在 150°C 及 220°C 处。这两次放热反应显然是合金在非晶态下出现某种型式的结构弛豫（即原子重排）释放出畸变能造成的。和这种结构弛豫相对应，我们观察到 $\text{Fe}_{38}\text{Ni}_{39}\text{P}_{14}\text{B}_6\text{Al}_3$ 的显微硬度也出现相应的改变，上海钢铁研究所测量到了这个合金在非晶态下加热时性的改变。

铜单晶的不连续屈服

王 子 孝

有两种不连续屈服理论: Cottrell 的位错脱钉扎理论和 Johnston 的位错增殖型屈服理论, 一般认为不能把上屈服应力想像为脱钉应力。

Hahn 曾根据 Johnston 理论提出应力应变的表达式

$$\sigma = q\epsilon_p + 2\tau_0[\dot{\epsilon}_p/\phi bf(\rho_0 + C\epsilon_p^2)]^{1/m}$$

Hahn 和 Cottrell 都曾利用此式计算过 bcc 铁的 τ - ϵ 曲线, 定性地解释了铁的不连续均匀屈服。还没有对 fcc 金属作过计算。一般认为铜的 $m \sim 200$, 不可能出现不连续屈服, 但 Greenman 等和 Suzuki 等分别得出 $m = 1$ 和 2。Yoshida 等发现细铜晶须有极显著的屈服陡降, τ - ϵ 曲线强烈地与晶须厚度有关。Kamada 等也观察到块状铜单晶的屈服降落。现都还没有理论解释。Yoshida 等和 Argon 等都认为 Johnston 理论不适宜于描述铜的屈服。本文首先分析铜的 m 值, 再计入位错交互作用, 将 Hahn 公式修正, 计算铜的 τ - ϵ 曲线。

1. 我们分析现有的 m 值数据, 发现 Jaffee 等是在较大应变条件下从 $\partial \ln \dot{\epsilon} / \partial \ln \tau$ 确定铜的 $m \sim 200$ 的, 所以铜的 m 值理应比 200 小。由于铜中位错运动不均匀及不稳定, Greenman 等的 $m \sim 1$ 有随意性, Suzuki 则是从位错最大位移值定出 $m \sim 2$ 的。所以铜的 m 值问题值得商榷。Li 认为微量杂质对 m 有影响。Cottrell 提到当铜的可动位错密度减至很小时 m 值可变得很小而 v 接近弹性波速。按位错动力学理论 $m = b\sigma A^*/KT$, 而 $A^* \propto 1/\sigma^2$, m 应随 σ 增大而减小。因此, 我们认为不能把现有 m 值作为铜的恒定参数。 m 与铜内部和表面结构完整性有关。晶须 m 值可能趋近粘滞流动极限值 ($m = 1$), 而块状较完整铜单晶 m 大些, 一般铜单晶及多晶 m 更大。我们从位错动力学理论分析也提出, 铜的屈服应力对 $\dot{\epsilon}$ 较不敏感, 并不一定如 Cottrell 等认为的是由于 m 大, 也可以是由于可动位错密度对 τ 较敏感。不同的 $\dot{\epsilon}$ 会有不同 f 值。

2. Johnston 理论和 Hahn 公式没有考虑宏观屈服前就已开始的位错运动、增殖及其交互作用。我们参照 Gills 等位错运动特征阻力随范应而增加的模型, 将 Hahn 公式修正为

$$\sigma = 2(\tau_0^* + H\epsilon_p)[\dot{\epsilon}/\phi bf(\rho_0 + C\epsilon_p^2)]^{1/m}$$

用 $m = 1, 1.05, 1.13$ 及 $m = 8, 15, 40, 100$ 及不同 H 值计算的 τ - ϵ 曲线与铜晶须、单晶及预经形变晶体的不同屈服行为定量符合很好。从而也证实了铜的 m 可在一大范围内变化的论点, 并表明 Johnston 理论仍适用于铜。

冷加工含氮铁合金的低频内耗

周如松 施肇光

用真空扭摆仪测量了铁氮合金的冷加工内耗峰，合金元素 Mn, Si, Cu 使峰变宽，峰高和峰温降低。注意到这个峰叠加在一个很高的背底上，背底影响着峰的形状，高度和峰温。在 300℃ 以下时效过程中，峰温和背底都逐渐下降并最后达到稳定。作者认为代位式合金元素 Mn, Si, Cu，特别是 Cu 有削弱铁中间隙杂质和位错交互作用的效应，而时效和背底则影响冷加工峰的测量可靠性，有深入一步研究的价值。

不同取向深埋椭圆裂缝的扩展

田德诚 朱家驹

利用薛昌明任意裂缝前沿应力场的表示式^[1]。我们曾根据最大周向张应力 $(\sigma_\theta)_{\max}$ 理论及应变能面最大正应力 $(\sigma_\omega)_{\max}$ 理论得到在三维介质中复合应力作用下任意裂缝扩展的开裂载荷的条件^[2]。

根据 $(\sigma_\theta)_{\max}$ 理论：开裂角由

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \theta}\right)_{K_i} = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \quad (1)$$

$$\theta = \theta^*$$

决定。(1)式中

$$F(\theta) \equiv K_1 \cos \frac{\theta}{2} \left(1 + 2\nu - \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) - K_2 \sin \frac{\theta}{2} \left(3 + 2\nu - 3\sin^2 \frac{\theta}{2}\right) \\ + \left\{ \left[K_1 \cos \frac{\theta}{2} \left(1 - 2\nu - \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) - K_2 \sin \frac{\theta}{2} \left(3 - 2\nu - 3\sin^2 \frac{\theta}{2}\right) \right]^2 \right. \\ \left. + 4K_3^2 \cos^2 \frac{\theta}{2} \right\}^{1/2} \quad (2)$$

开裂载荷由(1)式解得的 θ^* 代入

$$K_{1c} = \frac{1}{2} \cdot F(\theta) \quad (3)$$

求得。此处 K_{1c} 为ASTM 规定者除以 $\sqrt{\pi}$ 。

提据 $(\sigma_\omega)_{\max}$ 理论，开裂角由

$$\left[2S \left(\frac{\partial F}{\partial \theta} \right)_{K_i} - F \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)_{K_i} \right]_{\theta=\theta^*} = 0 \quad (4)$$

决定。开裂载荷由(3)式解算得到的 θ^* 值代入

$$\frac{1}{K_{1c}} = \left(\frac{1 - 2\nu}{4G \cdot S} \right)^{1/2} \quad (5)$$

求得。

(3)和(4)中， ν 为泊桑比， G 为切变模量， $F(K_i, \theta)$ 见(2)式， S 为应变能密度因子。

$$S \equiv \frac{1}{16G} \left\{ 4 \cos^2 \frac{\theta}{2} \left(2 - 2\nu - \cos^2 \frac{\theta}{2} \right) K_1^2 \right.$$

$$+ 16 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} - 1 + \nu \right) K_1 K_2 \\ + \left[12 \cos^4 \frac{\theta}{2} - 8(2 - \nu) \cos^2 \frac{\theta}{2} + 8(1 - \nu) \right] K_1^2 + 4K_2^2 \} \quad (6)$$

若在椭圆裂缝上固定正交坐标系 $X-Y-Z$, 原点为椭圆中心 O , OX // 长轴, OY // 短轴, OZ $\perp$ 椭圆平面, β 表张力矢量与 Z 轴所成角的余角, ω 为张力矢量在 $X-Y$ 平面投影与 X 轴的交角, 椭圆周上 P 点径矢的极角为 γ , 则 P 点处应力强度因子为^[1]

$$K_1 = \frac{\sigma \sqrt{a_e}}{E(k)} \sin^2 \beta; \\ K_2 = \sigma \sqrt{a_e} k' k^2 \frac{a}{a_e} \sin \beta \cos \beta \\ \left[\frac{\sin \gamma \sin \omega}{(k^2 + \nu k'^2)E(k) - \nu k'^2 K(k)} \right. \\ \left. + \frac{k' \cos \gamma \cos \omega}{(k^2 - \nu)E(k) + \nu k'^2 K(k)} \right] \\ K_3 = (1 - \nu) \sigma \sqrt{a_e} k' k^2 \frac{a}{a_e} \sin \beta \cos \beta \times \\ \left[- \frac{k' \cos \gamma \sin \omega}{(k^2 + \nu k'^2)E(k) - \nu k'^2 K(k)} \right. \\ \left. + \frac{\sin \gamma \cos \omega}{(k^2 - \nu)E(k) + \nu k'^2 K(k)} \right] \quad (7)$$

$$a_e = b \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \gamma}, \quad a, b \text{ 为椭圆长短轴, } k' = b/a, \quad k = \sqrt{1 - (b/a)^2}.$$

将(6)代入(1)(2)(3)(4), 我们利用 709 计算机解算了拉伸下不同轴比与取向的椭圆裂缝的开裂角和开裂载荷。结果表明:

- 1° 当轴比不为 1 时, 不同取向的椭圆裂缝的开裂都在靠近短轴的周界处首先开始。
- 2° 轴比一定时, 加载取向对裂缝扩展极限载荷有不大的影响。
- 3° 当短轴一定, 降低轴比时, 极限载荷也随之降低。当 $b/a < 0.1$ 以后, 轴比对极限载荷几乎不产生影响。

对双轴拉伸下, 不同取向圆裂缝开裂角和开裂载荷在本文中也进行了计算。

参 考 文 献

- [1] Hartranft, R. J. & Sih, G. C. Eng. Fracture Mech '9 3(1977)705
- [2] 田德诚、卢道全, 武汉大学学报(自然科学版) 3(1979)20

用衍射仪测定镀锌层组织的简易方法

魏铭鑑 孟锡明

介绍一种由一般衍射仪的资料, 计算择优轴组织的方法, 用这种方法对电镀锌层的组织作了计算, 可以明显的看到组织的存在及不同厚度中镀锌层组织的变化。

组织的测定, 在 x 射线多晶分析中是一个相当基本的方法, 通常有照相法和衍射仪法两种, 在衍射仪法中, 是用专门的组织相机测定衍射环各部的强度分布, 最后用极图或反极图表示出来, 这要求有专门的组织照相机, 我们发现用一般衍射仪的数据, 也能够估点出择优轴组织的择优程度, 其基本原理如下: 在衍射仪中, 计数器是依次记下各条衍射线的强度, 当样品中各晶粒的取向是完全无规分布时, 纪录得到的强度, 就是德拜相上各衍射线的相对强度, 当样品中有择优取向时, 由于衍射仪只纪录平行于样品表面的衍射面的衍射线 (衍射仪通常用板状样品), 所以就只有和样品表明平行的择优面, 其衍射强度增大, 而其他所有的反面其强度都减弱, 而且这些面减弱的程度和样品中各晶粒择优的程度有关, 因此就可以利用各谱线减弱的程度, 来确定样品的择优度。

离子注入硅太阳能电池*

邱万川 徐在贵 李金钗 潘显政

本文论述了用离子注入技术制作硅太阳能电池的特点、发展和前景。

离子束技术用于太阳电池的制造, 具有高度的工艺控制性能, 跟常规扩散技术相比, 具有一系列的优点。

我们研制了 p^+/n 型硼离子注入硅太阳能电池和 n^+/p 型磷离子注入硅太阳能电池, 采用真空热退火时, 转换效率优于10%, 有较好的光谱响应。

通过 SiO_2 、偏离沟道 7° , 用63Kev能量和 $10^{14} \sim 10^{15} \text{cm}^{-2}$ 的剂量对硅片注入, 得到深 $\sim 0.2\mu\text{m}$ 的 $p-N$ 结。为了消除辐射损伤和使掺杂原子电激活, 采用了真空热退火技术。对硼注入采用 900°C 、15分钟退火, 对磷注入采用 750°C 、15分钟退火。为了进一步提高离子注入硅太阳能电池的转换效率, 必须消除辐射损伤。脉冲退火技术比常规的热退火技术能更好地消除辐射损伤。我们对脉冲激光退火也进行了初步的试尝。对脉冲电子束退火, 文章也进行了评述。电子束具有独立调节能量密度和穿透深度的可能性和处理大面积产品的能力, 因此, 电子束退火可能更适于太阳电池的生产。

离子注入硅太阳能电池的研制工作是在自建的100Kev离子注入机和200Kev离子注入机上进行的。磷离子束流的扫描强度可稳定在 $10\mu\text{A}$ 左右。文章介绍了200Kev研究用离子注入机。由于研究用离子注入机具有多功能, 造价较高, 在生产用的场合可采用没有分析磁铁和束流传输系统短的专用离子注入机。目前国外已发展了束流强度为mA级的生产专用离子注入机。最后, 文章还提出了离子注入硅太阳能电池自动化生产的设想。即使离子注入硅太阳能电池的转换效率不再提高, 也可以利用离子束——电子束技术所固有的均匀性、重复性以及能利用多晶薄膜和单晶硅带进行大面积扫描实现大规模自动化生产硅太阳能电池的可能性, 消灭工艺废品, 大幅度地降低电池成本。也就是说, 离子注入硅太阳能电池的生产可以实现多、快、好、省, 使硅太阳能电池的地面应用成为现实。

总之, 离子注入太阳电池具有光明的发展前景, 受到国内外的重视。

全文约7000字, 包括图11幅、参考文献10篇。

* 本文曾在1979年9月召开的中国太阳能学会第一次学术报告会上报告过。

用红外付里叶光谱仪研究半导体中的杂质

叶 亦 英

§ 1. 前言

光子和固体中的电子以及各种光激发之间的相互作用,是研究固体的宏观性质和微观过程之间的联系的重要手段。我们用中红外和远红外波段的光波,来研究半导体中对材料性质起决定性作用的杂质。

由于实验所需的中、远红外波段,一般光源比较弱,光路中的 CO_2 和水汽吸收干扰比较大;实验需要在液氮或液氦 (4°K) 等低温条件下进行,控温要求灵活准确;光谱结构精细,因而对光谱仪波数的精度要求较高,故实验具有一定的难度。

我们和中国科学院半导体所理化室光学组的同志一起,利用 IFS115 型红外付里叶光谱仪,在国内首次成功地进行了半导体中杂质的低温红外吸收测量。

§ 2. 红外付里叶光谱仪介绍

通常的棱镜或光栅光谱仪是利用棱镜或光栅将不同波长的光,分布在空间的不同位置和方向,叫空间分光。付里叶光谱仪则是所谓调制分光,即利用一台 Michelson 干涉仪,使其可动镜作连续扫描移动,以连续改变两光束的光程差,从而对于光束进行调制,不同波长的光,其振幅受到不同频率的调制。由光源经样品吸收后的各种频率的光的光谱,经过上述调制,由探测器接受、放大,得到合成的光强随程差变化的干涉图。由于这干涉图在数学上正是上述光谱的付里叶变换对,故经过数学上的付里叶逆变换,就可以得到光强随频率变化的光谱图。所以这种光谱仪必须附有计算机,从而完成这种数学处理。

这种光谱仪信噪比高,分辨本领与光波频率无关,波数由激光器较准,波长范围宽,用反射镜代替棱镜,故仪器的分辨率很高,特别适用于做中、远红外波段的工作。但不能获得单色光。

§ 3. 研究硅、锗中的电中性杂质氧

氧在硅、锗中是一种常见杂质,对晶体性质和器件工艺、器件质量有重要影响。在室温下利用中红外波段对它进行研究的工作很多。利用氧在硅、锗中处于间隙位置,分别形成 $\text{Si}-\text{O}$ 或 $\text{Ge}-\text{O}$ 键,在中红外波段存在 1106cm^{-1} (对 Si) 和 855cm^{-1} (对 Ge) 特征吸收峰,从而建立 Si、Ge 中氧含量的非破坏测量的常规方法。但目前制作低能探测器和超大规模集成电路,要求材料中氧含量尽量低,因而必须提高探测灵敏度。

我们用 $2.5-25\mu\text{m}$ 波长范围, $2-0.5\text{cm}^{-1}$ 的分辨率,在低温下测量 Si、Ge 中氧的特征吸收峰及其精细结构。样品架用流动液氮或液氦致冷,电阻加热器变温,自动温度控制器

控温, 装有 KBr 窗口的样品架置入光路内进行红外吸收测量。采用硅碳棒光源, T. G. S 探测器。样品处实际温度用校准过的 Al—Fe 与 Ni—Cr 热电偶进行测量。用 In 箔改善冷接触处的热传导, 以获得 4°K 的低温。

实际效果

(1) 低温下的红外吸收测量 ($<20^{\circ}\text{K}$), 可明显降低 Si、Ge 中氧特性吸收峰附近的晶格吸收, 而明显增强了特征吸收峰本身。从而使探测限推到 $\sim 3 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$, 比室温测量探测限提高了三个数量级, 促进了不少科研单位的工作。

(2) 选用合适的氧含量和样品厚度, 成功地获取了中红外波段 Si 中氧特性吸收峰精细结构及其随温度 (室温 $\rightarrow 4^{\circ}\text{K}$) 的变化规律。为理论上进一步探讨氧在 Si 中的行为提供了丰富的实验基础。初步否定了于 76 年有人提出 1136cm^{-1} 峰是 Si 中 SiO_2 沉淀相所引起的论点。

§ 4. 硅、锗中浅施主 (或浅受主) 杂质的超纯分析——远红外光热电离谱

Si、Ge 中的浅杂质能级距导带低 (或满带顶) 很近, 仅几到几十个 meV, 故这些杂质的光吸收对应于远红外波段 ($<200 \text{cm}^{-1}$), 而且必须在低温下作, 以抑制热离化, 从而得出近于线光谱的杂质吸收谱。这些谱可以精确地反映不同杂质在半导体材料中的能级结构。但是用光吸收光谱来探测和研究这类浅杂质能级, 合适的杂质浓度为 $10^{12} - 10^{14} \text{cm}^{-3}$ 数量级。随着超纯半导体材料的出现, 要求进一步提高探测限至杂质浓度在 10^9cm^{-3} 以下, 这是所有目前已发展的包括放射分析在内的各种分析手段所达不到的。

光热电离谱的方法, 是利用在某确定条件下的非本征光电导光谱来探测和研究超纯材料中的杂质。其原理是: 在低温下束缚在晶体中杂质基态上的载流子, 吸收了低于其离化能的远红外波段的光子后, 光激发而跃迁到杂质的激发态, 然后吸收声子由激发态跃迁到导带低 (或满带顶), 产生热离化, 引起杂质光电导。这种方法探测限可推至 10^7cm^{-3} 杂质浓度, 是目前检测手段中探测灵敏度最高的。

实验用高压汞灯作光源。聚乙烯作样品室窗口。样品本身即探测器。聚乙烯膜作电绝缘, 并改善低温接触处的热传导。实验尚未最后完成。

由光热电离谱的清晰的谱线的实验数据, 可作为理论上探讨不同杂质离化能差异的可靠依据, 对固体物理研究可起促进作用。

大角度晶界结构模型与O点阵理论

王子孝 胡昌霖

曾提出过一些大角度晶界结构模型,如过渡点阵模型、小岛模型、无序群模型、密集位错阵列模型和相符位置点(简称 CSL)模型。自 Bollmann 等提出 O 点理论对 CSL 作出解释,加之电子衍射、高分辨电子显微术、场离子显微术及计算机模拟应用于晶界研究,CSL 模型近十年里引起人们特别注意,国外研究十分活跃。这是因为 CSL 模型的短周期、低能量结构不但可描述特殊位向晶界的一些特殊性质,而且这种结构可由类似于小角晶界中错配位错阵列来保持,对于这些位错已可赋予一定柏矢。与此同时也提出了结构单元模型和面匹配模型作为补充。电子计算机模拟对 CSL 模型作了新的解释,CSL 关系是一种位相关系,其重要特点不是点阵位置相符而是边界必须由一些小结构单元周期重复所组成。最近, Pond 等提出用双束衍射确定 CSL 是否连续跨越 CSL 晶界的实验方法, Matthews 等则用 Moire 条纹图案测量跨越 CSL 边界的点阵位移。

Bollmann 的 O 点阵理论用几何方法描述互相穿插的两个点阵阵点的最近邻关系,建立 CSL,确定 CSL 晶界位置以及与 CSL 偏离时可据以确定晶界二次位错网络柏矢的 DSC 点阵。

O 点阵理论讨论平移点阵,点阵 2 通过变换 A 由点阵 1 产生。

$$x^{(2)} = Ax^{(1)}, \det A \neq 0$$

而 O 点阵作为下列方程的一组解而被确定

$$x^{(0)} = (I - A^{-1})^{-1}b^{(L)}, \det(I - A^{-1}) \neq 0$$

$b^{(L)}$ 是点阵 1 的差矢量,由 $b^{(L)}$ 构成 B 点阵,所以由 $x^{(0)}$ 构成 O 点阵。O 点阵是 B 点阵的象。如点阵 2 相对点阵 1 位移 $d^{(2)}$,则 B 点和 O 点阵分别位移 $-d^{(1)}$ 和 $-d^{(0)}$,

$$d^{(1)} = A^{-1}d^{(2)}, \quad d^{(0)} = (I - A^{-1})d^{(0)}$$

在 $\det(I - A^{-1}) = 0$ 的情况, $x^{(0)}$ 的解与 $(I - A^{-1})$ 的秩数有关。

用类似 Wigner-Seitz 元胞法建立 O 胞结构,则点阵 1 和 2 的最近邻阵点间的几何关系可由点阵 1 阵点在 O 胞内位置确定,并可用图案表示。点阵 1 阵点在 O 胞内位置不同,图案组元不同。如 O 点阵的 O 点是点阵 1 的阵点,这个 O 点就是点阵 1 和 2 的相符位置点,所有这些相符点构成 CSL,它是 O 点阵的超点阵,CSL 模型的晶界就处在 CSL 密排面上。

对一定 A 来说,图案组元形状由 O 点在点阵 1 单胞内位置确定。如点阵 2 平移,引入描述 B 点相对点阵 1 原点的位移 D 图。有三种情况可使图案在整体上不变: (1) $d^{(2)} =$