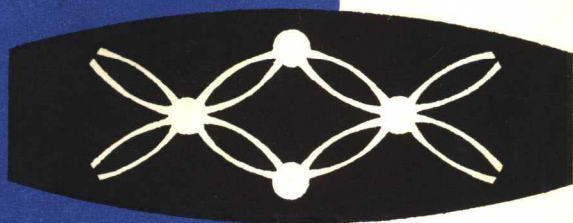


硅单晶缺陷显示面

七〇三厂编

Si



天津市科技局革委会情报组

毛 主 席 語 录

鼓足干劲，力争上游，多快好省地建设社会主义。

独立自主、自力更生、艰苦奋斗、勤俭建国。

工业学大庆。

中国应当对于人类有较大的贡献。

目 录

第一章 基本理论

§ 1. 点缺陷	(1)
§ 2. 位错——线缺陷	(2)
1. 两种简单的位错型	(2)
2. 位错产生的简单机构	(4)
(1) 位错的遗传	(4)
(2) 位错的增殖	(4)
§ 3. 点缺陷与位错的交互作用	(6)
§ 4. 半导体硅上的位错	(7)
1. 金刚石结构中的简单位错	(7)
2. 金刚石结构中的混合位错	(8)
§ 5. 单晶生长过程中位错的产生	(10)
1. 从籽晶引入的位错	(10)
2. 在晶体生长过程中引起的位错	(10)
§ 6. 达希 (W.C. Dash) 理论的局限性及我们的看法	(13)
§ 7. 位错对半导体电学性质的影响	(15)
§ 8. 位错对原子过程的作用	(17)

第二章 半导体硅单晶中各种具体的缺陷之腐蚀图象分析

§ 1. 位错排与星形结构	(18)
§ 2. 小角晶界及系属结构	(20)
§ 3. 边界线	(21)
§ 4. 反向生长; 枝蔓结构与网状结构	(22)
§ 5. 亚结构与蛛网状结构	(23)
§ 6. 辉纹与管道	(24)

第三章 硅单晶的腐蚀图象显示法

§ 1. 硅单晶 (111) 面位错的显示法	(29)
§ 2. 硅单晶 (100) 面位错显示法	(31)
§ 3. 硅单晶生长前沿显示法	(31)

附 录:

1.空间坐标中的各种晶面与晶向·····	(34)
2.常用物理数值表·····	(35)
3.硅在常温下主要的固有物性·····	(36)
4.硅中各种杂质的能级·····	(37)
5.有关杂质在硅中的分凝系数·····	(38)
6.有关杂质在硅中的挥发·····	(38)
7.有关杂质在硅中的扩散·····	(39)
8.硅中杂质的固相溶解度·····	(40)
9.硅单晶的定向籽晶的制备·····	(42)
10.硅中载流子浓度与电阻率的关系·····	(43)

毛主席语录

一个正确的认识，往往需要经过由物质到精神，由精神到物质，即由实践到认识，由认识到实践这样多次的反复，才能完成。

第一章 基本理论

半导体硅晶体中的缺陷种类是繁多的，它们大致可以分为点缺陷——杂质原子（替代式的或间隙式的），点阵空位和间隙原子；线缺陷——位错；及面缺陷——晶粒间界和层错。这些缺陷的存在，广泛地影响着硅晶体的物理性质及电学性能，直接地危害着半导体器件的质量。因此对硅单晶完整性的研究在半导体技术上有着重要的意义。

在这一章中，我们仅对硅单晶中的点缺陷和线缺陷进行讨论，而有关面缺陷的部份我们则将其纳入第二章中的有关具体的图象中去分析。

鉴于半导体器件的应用，我们只是从晶体生长过程及对电学性能的影响的角度去研究硅中的缺陷。有关缺陷对晶体其他性能的影响则不涉及。

§ 1. 点 缺 陷

毛主席教导我们：辩证法的宇宙观，主要地就是教导人们要善于去观察和分析各种事物的矛盾的运动，并根据这种分析，指出解决矛盾的方法。

晶体中的点缺陷共包括点阵空位（简称空位），间隙原子（或称填隙原子）和杂质原子（替代式的或间隙式的）。其中点阵空位和间隙原子这两种点缺陷的存在与晶体的温度的影响有着直接的关系。它们在物理上是可逆的，即温度增高时，这类缺陷的数目增多，温度降低时，数目减少。因之有人把这类缺陷称为“热缺陷”。由于点阵空位和间隙原子的产生和复合与晶体的温度的高低存在着一定的平衡关系，因之也可把这类缺陷称为“平衡缺陷”。本文在此着重讨论平衡缺陷。而在半导体硅晶体中，上述杂质原子则是从外部有意识地引进的（如掺进Ⅲ族或Ⅴ族元素），杂质原子的存在通常与晶体的温度并无直接关系，因之可称为“非平衡缺陷”。硅单晶中这些杂质原子（如Ⅲ族元素B，Al，Ga和Ⅴ族元素P，Sb和As等）固然也是属于点缺陷的范畴，但由于这些元素原子的能级在硅晶体的能带中所处的位置正好在禁带中的满带顶及导带底的附近，硅中这些元素的浓度严格地控制着硅单晶的电学参数，诸如电阻率，迁移率等。从而人们不仅把它们当做缺陷来讨论，而更重要地是把这些杂质原子在硅中的行径突出地当做另一个专门的内容来讨论。这已经超出了本文的范围，故此

我们不再在此占用篇幅。

“点阵空位”是从晶体中的晶格点上移去一个原子所形成的一种缺陷。而“间隙原子”则是在晶体中的晶格点之间引入一个原子所形成的一种缺陷。当原子从晶格点上被移至间隙位置而留下空位时，缺陷有时是成对地产生的，这些对则称为“弗兰克”缺陷。在这里，点阵空位与间隙原子的数目相等。在一定的温度下，“弗兰克”缺陷的产生和复合的过程相平衡。另一方面，这些点缺陷也可以不是成对的。空位可以单独从晶体外表面依靠扩散而吸入；晶体范性形变时，可以认为空位与间隙的形成是彼此无关的。不成对地形成的点阵空位称为“肖特基”缺陷。

产生点阵空位和间隙原子的原因，不外乎以下几种：(1) 热能，高温时热起伏促使点阵原子脱离点阵位置而产生点缺陷，在以后的冷却过程中，它们部份地被冻结在晶体中。同样地，在晶体的生长过程中，如果生长速度很快，且晶体冷却速度也很快，则生长界面处的空位将来不及扩散到表面去，而能引起空位的冻结。(2) 点缺陷可由位错的形成和互作用而产生，并可以和运动的位错一起运动。如在冷加工过程中，范性形变时一滑移面上运动的螺旋位错与另一个滑移面上的静止螺旋位错交叉时，产生割阶，后者的非保守运动产生点缺陷。

(3) 辐照，当高能粒子照射时，使晶体中点阵原子离位而同时生成点阵空位与间隙原子。在通常的情况下，尤其在晶体的生长过程中，根据理论计算，产生间隙原子需要消耗很大的能量，且由于间隙原子的迁移激活能很小，只能在极低的温度下存留。所以，只有空位才是比较重要而又常见的点缺陷。

点缺陷的存在对硅晶体的电学性能是有影响的。在共价型的半导体硅中，每个硅原子最外层一共有四个价电子，晶体中的“空位”使近邻原子上留下未饱和的共价键。这些未被饱和的共价键具有束缚住电子的趋势，而电子则来自满带以及其他被占据的能级。因此空位被认为是个受主中心。同样，间隙原子具有四个可以失去的未束缚于轨道的价电子，因此间隙原子可以是个施主中心（但间隙原子本身并不是硅原子时，则也可以是个受主中心）。

在硅晶体中，起受主和施主作用的点阵空位和间隙原子对电学性能的影响可以在高能粒子的辐照实验中通过低温霍尔系数的测定由非平衡载流子浓度的变化来证实。

在硅单晶的生长过程中，点缺陷（如上所述，主要是空位的大量存在）与位错是有互作用的。过量饱和度空位的凝聚会引起位错的成核与增生。但空位的过饱和机制却有利于位错的攀移。有关这一部份的细节我们在以后的章节里再另行讨论。

§ 2. 位错——线缺陷

毛主席教导我们：分析的方法就是辩证的方法。所谓分析，就是分析事物的矛盾。

位错是晶体中的线缺陷。晶体中位错的形态是繁多的。本节从基本的概念出发，粗略地讨论一下简单的位错型及位错产生的简单机构，有关半导体硅中的位错的分析则在以后的章节中逐步深入。

1. 两种简单的位错型

见图 1.1 如有一晶体，其三条稜边刚好与三条互相垂直的 x ， y ， z 轴相重合。若用刀

从Y方向平行于XY面切入晶体如阴影面ABCD。若以ABCD面作为滑移面，对该面上部晶体施加一应力作用。

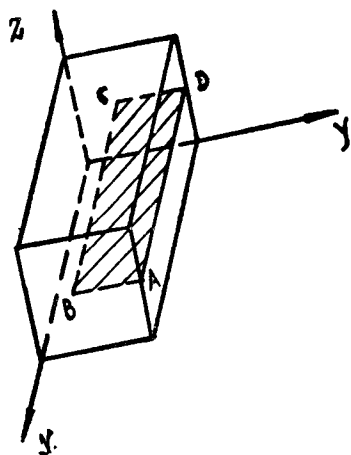


图1.1在晶体中平行于XY面切一刀

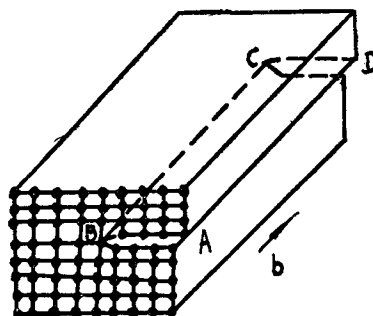


图1.2螺型位错

(1) 在此应力的作用下，ABCD面上部晶体如沿X轴方向位移一个原子间距而后胶合。如图1.2。则此时在BC处形成的位错称为螺型位错。

(2) 若在Y轴方向位移一个原子间距而后胶合。如图1.3，则此时在BC处所形成的位错称为刃型位错。

若在滑移方向上设定一柏氏矢量 b (Burgers矢量)。 b 等于原子间距或其整倍数。则显然在滑移面内，刃型位错线与柏氏矢量垂直，而螺型位错线则与柏氏矢量平行。

若位错线与其柏氏矢量既不垂直也不平行，而是成任意的其他角度，则此位错线为混合位错，可以将此位错分解成刃型位错与螺型位错。

由以上的简单叙述可以看出位错的一般特性：

(1) 位错是晶体中原子排列的缺陷，它是一种线缺陷，但并不是几何学上所定义的线。严格说来，位错是有一定宽度的管道。

(2) 位错必须在晶体中成一封闭的环形，或者可以终止在晶体的表面及晶粒间界上，但不能终止在晶体的内部。

(3) 位错环把晶体中变形部分和没有变形部分区分开来。

(4) 在位错环的管道内及附近有甚大的应力集中，在晶体中形成一个应力场。在位错的管道内原子的平均能量比其它地区的大得多。

常用位错密度来描述晶体内位错线的多少。位错密度指单位体积内位错线的总长度。在常用的位错显示法中，则以通过晶体的某一晶面的单位面积上位错坑的数目来表示该晶面上的位错密度。这两种描述法是完全相同的。

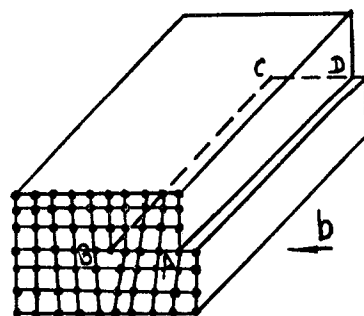


图1.3刃型位错

2. 位错产生的简单机构

(1) 位错的遗传：原有的位错在晶体生长过程中继续延伸；在这种情况下，位错密度是不变的。

由以上的讨论知道，位错线标志晶体内滑移区域的边界，因此它必须在晶体内形成一个闭合迴线，或者是终止于晶体表面。见图1.4，如滑移面就在画面上，设滑移只在A区发生，则曲线PQRS就是滑移区A的边界，也就是一根闭合的位错线。如果滑移情况如图1.5，A为滑移区域，边界PQR即位错线，在这种情形位错线两端都终止在晶体表面上。

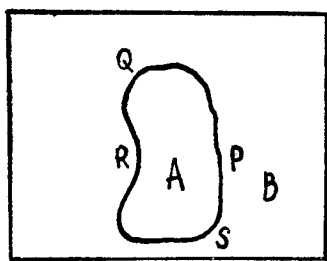


图1.4位错线形成闭合回路

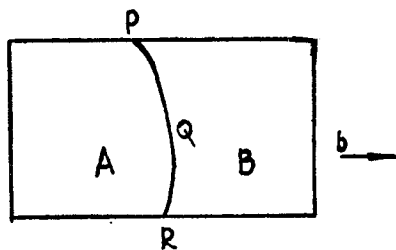


图1.5位错终止在表面

由于位错线的这一特点，位错线不可能在晶体内部中断。因此在晶体中原有的位错线在晶体生长过程中必然继续延伸（如图1.6），直至延伸到晶体表面或者与别的位错线相交为止。

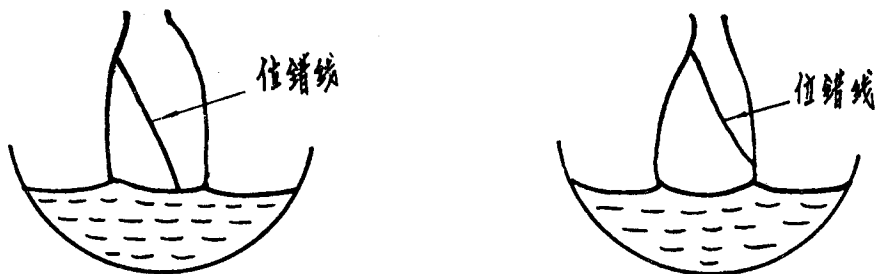


图1.6位错线在晶体生长时继续延伸

这种位错线的延伸，并不会增加位错线的数目，只是增长位错线的长度，因此在它终止于表面或者与别的位错线相交以前，位错密度是不会改变的。

(2) 位错的增殖：关于位错的增殖，提出过许多机构加以解释。在这里我们仅介绍一种比较成熟的弗兰克——瑞德 (Frank-Read) 机构。

如图1.7所示。若有位错线，只有一段AB在滑移面上，而AB两点则离开滑移面向上或向下延伸。由于在受到外力作用时，不在滑移面上的位错线不易于移动，这样，位错两头的AB两点就如同被固定起来了。

施加一适当的压力（如热应力或机械力）将推使滑移区向前扩展。但由于A，B两点不

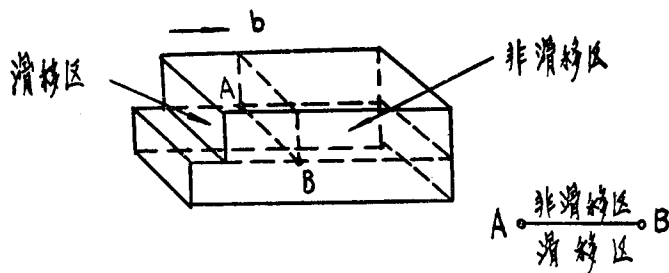


图1.7 定点A和B之间的一段位错线

动，位错线AB将发生弯曲，如图1.8中的2)；如果应力足够大，则位错线弯曲程度将不断加剧，以致如图1.8中的3)至5)；后来a，b部份将会相碰而结合起来，最后成为一个位错环和另一根AB位错线，如图1.8中6)。

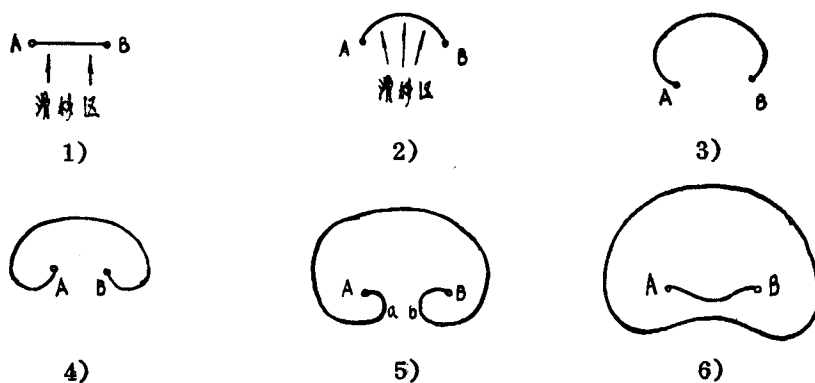


图1.8 弗兰克——瑞德机构

如果位错线的一端终止在边界上，也会发生类似的情况，如图1.9所示。

如果不断受到足够大的应力的作用，上述的过程便会不断发生，结果出现一系列的位错环。用铜沉淀法可以在硅晶体中显示出这种位错环。

根据上述机构，可以认为固定在晶体内两点之间的一个位错，能够起着晶体内位错源的作用。当受到适当的应力的作用时，原则上它能够增殖出一系列的环形位错。这些环形位错会不断扩展，最后会交于晶体表面而形成如图1.10所示的位错线。这也就说明了为什么在晶

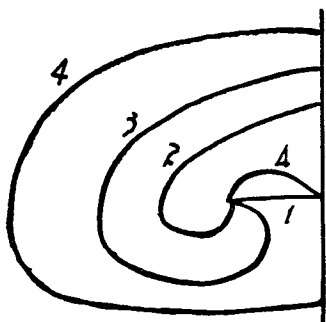


图1.9—端终止在边界时的弗兰克——瑞德机构

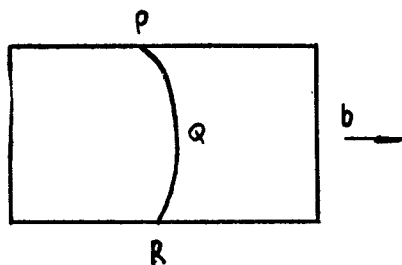


图1.10 位错终止在表面上

体内，我们经常看到的是线状的位错，而不是位错环。

必须指出，并非任意的应力都能引起位错的增殖。应力较小时只能使晶体发生弹性形变。只有当应力超过一定数值，才能引起晶体滑移，产生位错。

有关的研究表明，除了上述的 Frank-Read 位错增殖机构外，在硅晶体中还有螺型位错能够通过交叉滑移发生增殖的机构及其他机构。

在上述位错增殖机构中的位错源，可能是在晶体生长时生成的，即原生位错。这些位错可能是分布紊乱的孤立位错，或是规则网络中的位错（如位错排及小角晶界中的位错线段）；也可能是在晶体生成后，由于特殊的需要，用一定的方法，如印压、弯曲、扭转等向晶体内部有意引入的新位错。晶体表面上的稜边，台阶，机械伤痕和晶体内的缺陷（杂质团，小粒子和空洞等），都是能产生应力集中之处，当晶体受外力作用时，在该处能够引起位错的不断成核，位错不断地从这里运动出去，增殖出大量的新的位错。对于上述外力，有关的实验表明，在使位错成核与增殖作用上，热应力同机械应力是等效的。

而全面地说，位错能否发生增殖，主要地决定于位错源所受分切应力的数值、晶体温度、位错本身的结构特点以及钉扎情况（也包括位错与点缺陷，杂质的相互作用）等等。其可能的影响因素是很多的。

§ 3. 点缺陷与位错的交互作用

毛主席教导我们：马克思主义的哲学认为，对立统一规律是宇宙的根本规律。这个规律，不论在自然界、人类社会和人们的思想中，都是普遍存在的。矛盾着的对立面又统一，又斗争，由此推动事物的运动和变化。

我们不难从一般的关于金属强度的文献中得知，金属的强度取决于位错的弹性应力场，所以点缺陷对强度的影响，必须通过它们与位错之间的交互作用。但由于本文的目的并非从强度的角度来讨论点缺陷与位错的交互作用，且由于点缺陷与位错的交互作用的问题是一项理论性很强的工作，我们在此仅能从半导体硅单晶生长的角度对点缺陷与位错的交互作用作一些定性的讨论。

我们知道，与点阵空位相邻的原子，因沿空位方向弛豫而发生位移。间隙原子（或间隙式杂质原子）也因与晶格点阵之间的间隙有着大小和形状的不合，而能引起局部的晶格畸变。同样，替代式的杂质原子与硅原子间因大小的差别，也使其近邻原子发生位移。所以点缺陷都能在晶体中产生内应力。这些内应力场与位错应力场交互作用的结果，使位错的应变能降低，其所降低的能量，便是点缺陷与位错间的交互作用能。在足够高的温度下，位错与点缺陷间交互作用的引力，可以诱导后者聚集在位错线附近，这样更进一步降低晶体的应变能。因此，点缺陷在晶体中的平衡分布是不均匀的：杂质原子将沿着位错线形成原子云（气团），而点阵空位趋向于凝聚成片状空位团，二者都能阻碍位错的运动，降低位错的迁移率。因此，基于这种原理，点缺陷的存在，固然其本身将在晶体中产生应力，但是由于点缺陷与位错的交互作用，而能使得在晶体的生长过程中阻碍位错的运动与延伸，有利于晶体中位错密度的减少。比如在重掺杂磷与硼的硅单晶中，当电阻率在 $10^{-2} \sim 10^{-3} \Omega\text{-cm}$ 范围内时，晶体中是极不易观察到位错的。（当然，如果硅晶体中的杂质浓度过高，则因杂质的局部富

集而引起晶格的严重扭曲，以致产生新的位错及其他缺陷）。

由本章第一节我们知道，产生间隙原子需要消耗很大的能量，且由于间隙原子的迁移激活能很小，只能在极低的温度下存留。所以，实际上晶体中的间隙原子是很少的，我们无需在此讨论它。而有关位错与杂质原子的交互作用则在以后的章节中及有关的特殊缺陷的分析中再分别讨论。在此我们再对空位与位错的交互作用进一步讨论一下。我们知道，在硅单晶的生长过程中，空位是大量的产生与冻结的。

在通常的晶体生长速率下（数量级为几毫米/分），固液交界面附近晶体的冷却速度可以达到 $100-400^{\circ}\text{C}/\text{分}$ 。如果晶体的直径足够大（例如一厘米以上），由于空位的扩散系数的数量级为 $10^{-6}\text{厘米}^2/\text{秒}$ 以下，空位将来不及扩散到表面去，而冻结在晶体里，成为过饱和的空位。显然，如果选择较大的生长速率及固体中较大的轴向温度梯度，将易于得到过饱和的空位。

由于上述空位与位错的交互作用，从而使得在晶体生长过程中，位错的产生，运动和消灭与晶体中的空位有关。我们知道，刃型位错的存在，相当于在晶体内插入了半层原子。因此，位错线下降一位（一个晶格间距）或上升一位（即位错线从一个滑移面移动到相邻的滑移面上去，这种移动叫做位错的攀移）就意味着在这半层原子上多增加一排原子或者是挤掉一排原子，也就是从四周夺取原子而引起了空位，或者把原子推向四周而消灭了空位。由此可见过饱和空位的存在有利于位错的攀移，因而有助于位错移出晶体外。所以，基于这种过饱和空位的存在有利于位错攀移的机构，我们可以在具体的硅单晶生长工艺中，通过选择合适的生长速率和合适的热场（固体中轴向温度梯度较大及其他）来降低晶体中的位错密度。我们在大量的实验中，证明这也是一条降低硅单晶中位错密度的途径。这个问题在以后的章节里还将另行讨论。（注：在这里应该指出，在空位过饱和的情况下，由于螺型位错并不会在垂直于其轴的方向移动，且在硅晶体中，通常螺型位错线多取 $\langle 110 \rangle$ 方向，螺型位错将不会因空位的过饱和而沿着垂直其轴的方向攀移，它只能在平行其轴的方向上攀移成一个螺旋体。因之，还须在选择合适的晶体生长方向如 $\langle 100 \rangle$ 及 $\langle 111 \rangle$ 方向下，以能使螺型位错延伸至晶体的表面上去）。

§ 4. 半导体硅上的位错

毛主席教导我们：列宁说，对于具体情况作具体的分析，是“马克思主义的最本质的东西、马克思主义的活的灵魂”。

共价型半导体硅的原子排列是一种金刚石型的结构（参看图1.11）。就金刚石结构的原子排列而言，当考虑到可以形成位错的原子排列方式时，其种类是很多的。

1. 金刚石结构中的简单位错

在金刚石结构中， $\langle 110 \rangle$ 方向的柏氏矢量最短，此时柏氏矢量为 $\frac{1}{2}a \langle 110 \rangle$ （ a 为

原子间距）。在金刚石结构中（111）面是原子密排面，所以滑移面是（111）面。共有三种最简单的螺型位错（参看图1.12）。其中有柏氏矢量位错，位错线方向相同的位错，以及其

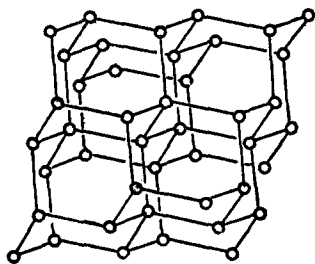


图1.11金刚石结构

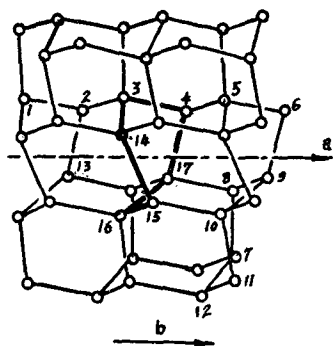


图1.13 在 $\langle 110 \rangle$ 方向上具有位错线的螺旋型位错，a、b是位错线及柏氏矢量的方向。

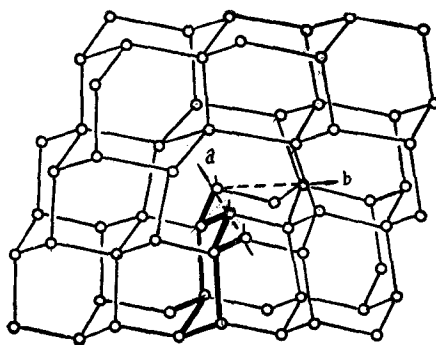


图1.12 为 60° 位错在 $\langle 110 \rangle$ 方向上有位错线，在(111)面上有滑移面，粗线表示多余的原子面。

角度为 60° 的位错。这种位错的滑移面也与上述的具有 $\frac{1}{2}a \langle 110 \rangle$ 的柏氏矢量的刃型位错相同，均以(111)面作为滑移面。如果是(100)面为滑移面，并具有 60° 角的位错线和柏氏矢量时，则可形成刃型位错。这样的位错有两种，一种是有多余的原子面的，另一种其最邻近的原子全部有四个而又完全地键合在一起。

我们可以看到，有多余原子面的刃型位错有着沿位错线的方向的一系列没有配位的“悬挂键”。这种刃型位错所具有的“悬挂键”对位错的运动起着很重要的作用。其电学性质也很显著。

当位错的滑移面及滑移方向发生多种变化时，位错的原子排列也会发生多种多样的键合（参看图1.13）。

2. 金刚石结构中的混合位错

在金刚石结构中的混合位错，如果以 $\frac{1}{2}a \langle 110 \rangle$ 为柏氏矢量时，则可形成一种使位错线的方向按表1.1变化的位错。

表 1.1

形状	位错线方向	位错线与柏氏矢量所形成的角度	滑移面
1	$\langle 211 \rangle$	30°	(111)
2	$\langle 211 \rangle$	90°	(111)
3	$\langle 211 \rangle$	$73^\circ 13'$	(311)

4	$\langle 211 \rangle$	$54^\circ 44'$	(110)
5	$\langle 100 \rangle$	90°	(110)
6	$\langle 100 \rangle$	45°	(100)

形状1及形状2是简单位错。当位错运动时，起着位错增殖机构作用的可能就是这种形状1或形状2的位错。形状1如图1.14所示，存在“悬挂键”。

根据位错的形状，也就是根据位错的滑移面及柏氏矢量的方向的不同，“悬挂键”的单位长度上的数值也要发生变化。表1.1中3的位错是在1个原子上出现两个“悬挂键”，两个“悬挂键”交错地存在位错线的方向上（参看图1.15）。这两个“悬挂键”如果通过扩散发生变化时，则变化情况如图1.16所示。

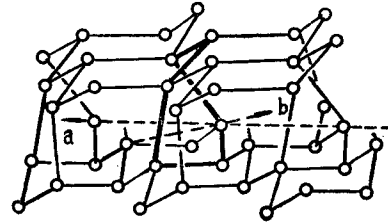


图1.14 这种位错叫作 30° 位错在 $\langle 211 \rangle$ 方向上具有位错线，在 (111) 面上具有滑移面。

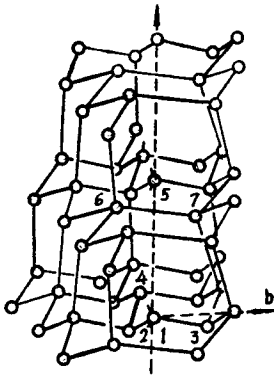


图1.15 73° 位错在 $\langle 211 \rangle$ 方向上有位错线，而 (113) 面为滑移面。

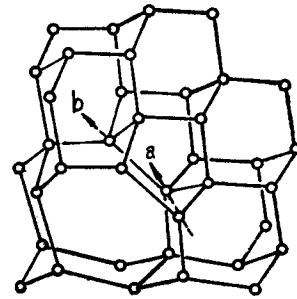


图1.16 通过扩散发生位错再排列的情况，这时“悬挂键”消失。

表1.1中的4，5非常相似，是一种 (110) 滑移面上的刃型位错，这种位错在晶体的“小角晶界”中起着重要的作用。

表1.1中6是 45° 位错，沿着位错线每隔一个原子存在一个“悬挂键”。当两个“悬挂键”合成一起时，则可能就不成为“悬挂键”了。如果一个“悬挂键”俘获一个电子，而其最近的另一个“悬挂键”也俘获一个电子，则这两“悬挂键”就完全有可能形成一个完全闭合的电子轨道（参看图1.17）。

综上所述，我们有必要在此再重复地总结一下：在硅单晶中，在通常的情况下，其主要

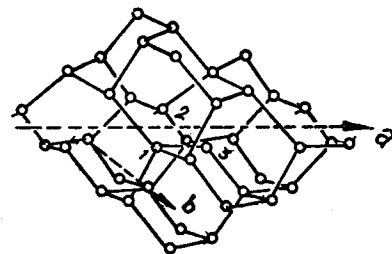


图1.17 为 45° 位错，在 $\langle 001 \rangle$ 方向上有位错线，而 (100) 面为滑移面。

的滑移面为 $\langle 111 \rangle$ 面, 滑移方向是 $\langle 110 \rangle$ 方向, 因此相应的刃型位错线的方向应为 $\langle 211 \rangle$, 螺型位错线的方向应为 $\langle 110 \rangle$ 。直至今日为止, 对于直拉法生长的单晶, 在生长过程中引起的位错线的取向, 一般地是 $\langle 211 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ 和 $\langle 110 \rangle$ 。

§ 5. 单晶生长过程中位错的产生

毛主席教导我们: 从感性认识而能动地发展到理性认识, 又从理性认识而能动地指导革命实践, 改造主观世界和客观世界。实践、认识、再实践、再认识, 这种形式, 循环往复以至无穷, 而实践和认识之每一循环的内容, 都比较地进到了高一级的程度。这就是辩证唯物论的全部认识论, 这就是辩证唯物论的知行统一观。

上面我们讨论位错的一般概念及对应金刚石结构型的硅晶体的位错的基本理论。下面我们来讨论一下在具体的硅单晶生长过程中产生位错的几种可能的方式。应该说明的是, 我们在这里也只能粗浅地, 一般地讨论之。有关各种复杂的位错形成的机构从理论上的探讨是很困难的。至于各种硅单晶中出现的特种位错型乃至其他种类的缺陷, 如面缺陷等, 我们将在后面第二章中各个地单独地作出试探性的分析。

1. 从籽晶引入的位错。

由前面的讨论知道, 在一般的情况下, 在晶体的生长过程中, 位错是会遗传的。这样, 如果籽晶中有位错的话, 位错会随着晶体的生长不断延伸。在硅晶体中, 其主要的滑移面是 $\langle 111 \rangle$ 面, 因此一般地说, 位错都处于 $\langle 111 \rangle$ 面上, 位错的延伸也就在 $\langle 111 \rangle$ 面上进行。显然, 晶体生长方向与 $\langle 111 \rangle$ 面的最小夹角愈大, 则位错线将随着晶体的生长愈快地斜插到晶体表面而终止; 反之, 如果夹角很小, 则位错线可以在晶体内延伸很长, 甚至贯穿整个晶体。因此选择合适晶向如 $\langle 100 \rangle$ 及 $\langle 111 \rangle$ 方向的籽晶及采取拉细颈的工艺乃是一种避免籽晶中位错的遗传的有效措施。(参看表 1. 2)

表1.2 $\langle 111 \rangle$ 面与生长方向之间的夹角

生长方向	$\langle 100 \rangle$	$\langle 111 \rangle$		$\langle 110 \rangle$		$\langle 211 \rangle$		
(111) 晶面数目	4	1	3	2	2	1	1	2
(111) 晶面与生长轴之间的夹角	$35^{\circ}16'$	$90^{\circ}00'$	$19^{\circ}28'$	0°	$54^{\circ}44'$	0°	$70^{\circ}32'$	$28^{\circ}08'$

2. 在晶体生长过程中引起的位错

除去原有位错的遗传, 在晶体生长过程中还可以由于存在应力而引起位错的增殖。当然, 如果应力的数值只能引起晶体的弹性形变是不会引起位错的增殖的。只有当应力超过一定数值时, 才能引起位错的增殖。

(1) 晶体在生长过程中受到机械震动, 产生机械应力, 当这种应力足够大时, 按照弗兰克——瑞德机构就会从原有位错增殖出新的位错来。

(2) 在单晶生长过程中, 无论在熔体中或是晶体中都存在着一定的温度梯度, 温度梯度的存在会引起热应力。这种热应力的存在乃是在实际的硅单晶生长过程中位错增殖的主要原因。

下面我们采用一个极为近似的模型从数学上来推导出在生长过程中晶体中大致温度分布状况。

设有一圆柱形晶体, 半径为 r_c , 并且足够长, 可以看做半无穷棒, 晶体的一端(即 $Z=0$)与熔体接触有固定的温度 T_m , 即熔点(如图 1.18)。

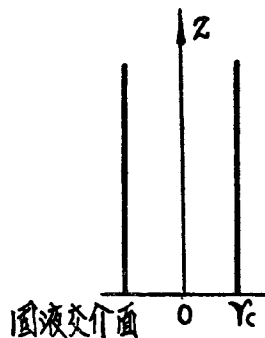


图1.18与熔液相接的半径为 r_c 的晶体

利用柱坐标, 则可以写出热传导的微分方程:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} = 0 \quad (1.1)$$

边界条件为: (i) 当 $Z=0$ 和 $0 \leq r \leq r_c$ 时, $T=T_m$; (ii) 从表面幅射出去的热量应当等于传到表面上的热量, 即当 $0 < r < \infty$ 和 $r=r_c$ 时

$$K \frac{\partial T}{\partial r} = HT, \quad (1.2)$$

其中 K 是热导率, H 是辐射系数, 它们一般与温度有关。作为粗略近似, 可以把它们看成与温度无关的常数, 令

$$h = \frac{H}{K} \approx \text{常数}。 \quad (1.3)$$

可得 (1.1) 式的近似解为:

$$\frac{T}{T_m} \approx \left[1 - \frac{r_c h}{2} \left(\frac{r}{r_c} \right)^2 \right] \exp \left[-\frac{Z}{r_c} (Z r_c h)^{1/2} \right] \quad (1.4)$$

由此可见, 在一般近似的情况下, 温度沿径向按抛物线规律变化, 沿轴向按指数变化。

由于存在温度梯度, 各处热膨胀程度不同, 因而存在热应力。锭的表面温度低, 中间温度高, 中央受到压缩的应力, 锭的表面受到扩张的应力。

事实上, 由于晶体形状并不是粗细均匀的圆柱体, 并且一般情况下固液交界面也并非平面, 因此实际情况比上述分析要复杂得多。

由于通常在生长出来的晶体内, 总是难免有位错, 因此按照弗兰克——瑞德的机构, 这些热应力的存在可以引起晶体内位错的增殖。事实上, 一般的单晶, 其位错密度是从头至尾不断增加的; 而且生长过程中温度梯度愈大, 增加也愈显著。

下面粗略地推算温度梯度和位错密度的关系。

先看当晶体弯曲时, 位错密度与弯曲程度的关系。一块晶体受到弯曲时发生范性形变, 这种形变可以用图1.19来表示。可以把晶体看作是由许多薄层组成如图1.19a)所示。在晶体弯曲时各层之间发生滑移, 它们的交界面就是滑移面, 每一晶体薄层的上表面被拉伸, 下表面

被压缩，如图1.19b)所示。这种滑移产生刃型位错，它们分布在各滑移面上，如图1.19c)。

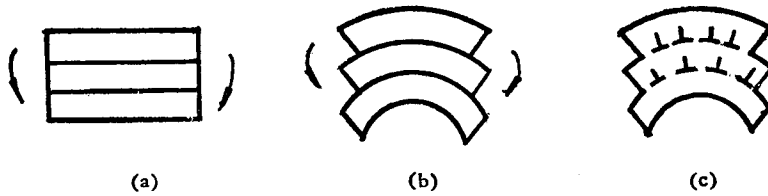


图1.19晶体弯曲产生位错

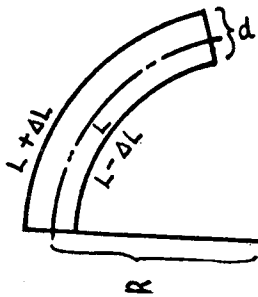


图1.20晶体薄层的弯曲

设薄层厚为 d ，长为 L ，宽为 a ，弯曲的曲率半径为 R ，上表面伸长 ΔL ，下表面压缩 ΔL ，如图1.20，从几何关系可知：

$$2\Delta L = \frac{Ld}{R} \quad (1.5)$$

另一方面，显然 $2\Delta L$ 又是两个晶体层相互之间的相对滑移的总长度。要产生这样大的滑移量，则需要 $\frac{2\Delta L}{b}$ 个强度为 b 的位错 (b 为柏氏

矢量，即其滑移量)。因此，用单位体积内的位错线长度，亦即位错密度 N_D ，就应该为：

$$N_D = \frac{2\Delta L}{b} \cdot \frac{1}{Ld} \quad (1.6)$$

$$\text{代入 (1.5) 得 } N_D = \frac{1}{Rb} \quad (1.7)$$

如果这种弯曲是由温度梯度引起的，则根据 (1.7) 式) 可以估计位错密度与温度梯度的关系。

对于晶体内长为 L 厚为 d 的薄层，沿着薄层厚度的方向有温度梯度 $\frac{\partial T}{\partial y}$ 时，就引起较热的那表面的膨胀，使薄层长度增加了

$$2\Delta L = \alpha L d \frac{\partial T}{\partial y} \quad (1.8)$$

其中 α 是热膨胀系数。即弯曲半径为

$$R = \frac{1}{\alpha \frac{\partial T}{\partial y}} \quad (1.9)$$

将 (1.9) 代入 (1.7) 则得

$$N_D = \frac{\alpha}{b} \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \quad (1.10)$$

这就是位错密度与径向温度梯度的近似关系。

必须指出，温度梯度并不一定引起热应力。有关的计算表明，如果只有轴向温度梯度，

且它为一常数，而没有径向温度梯度时，即

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial Z} = \text{常数}, & (1.11) \\ \frac{\partial T}{\partial r} = 0, & (1.12) \end{cases}$$

则不会引起热应力。当然这只是一种理想的状况，要满足这条件，则要求：(i) 没有径向热流；(ii) 生长速率为零；(iii) 晶体不转动。其中(ii)和(iii)两条件保证了晶体各处的温度不随时间改变。在实际的晶体生长过程中，这三个条件是不存在的，但我们却可以通过工艺的改进，去尽量地减小径向温度梯度（即调平晶体生长前沿），以能使得由于径向温度梯度所引起的热应力不至于超出晶体弹性形变的范围，从而免除位错的增殖。

(3) 在晶体生长过程中，其他诸如生长速率过快，杂质的局部富集等都可能引起位错增殖，这些我们都可以在工艺上找到解决的途径。

§6. 达希 (W. C. Dash) 理论的局限性及我们的看法

毛主席教导我们：一切外国的东西，如同我们对于食物一样，必须经过自己的口腔咀嚼和胃肠运动，送进唾液胃液肠液，把它分解为精华和糟粕两部份，然后排泄其糟粕，吸收其精华，才能对我们的身体有益，决不能生吞活剥地毫无批判地吸收。

我们知道，在广泛的制备无位错硅单晶的研究工作中，达希的“无位错单晶硅的生长”理论曾经起着且还在起着积极的作用。但是，随着硅单晶研制工艺的进一步发展完善，尤其在目前这种大投料大直径硅单晶的制备工作中，我们将会发现达希的基本理论已经暴露出某些局限性。因此我们想在这里提出一些看法与读者共同讨论。应该指出的是，在这里，我们还只是从基本理论上作一些粗浅的试探，而并非从工艺条件上对无位错硅单晶的制备解决具体的途径。

为了说明问题起见，在此无妨首先简要地介绍一下达希的“无位错单晶硅的生长”理论的梗概。

1. 达希的“无位错单晶硅的生长”理论的梗概

(1) 位错的来源：

①认为晶体生长过程中的位错来源主要由籽晶引入。

a. 籽晶中位错在固液交界面处的遗传。

b. 籽晶中位错的热冲击倍增及其遗传。

c. 由籽晶表面的机械伤痕引起的位错环群体。

d. 来自籽晶处及晶体其他部位的新结晶物质的不良的定向联生。

②晶体中不会在内部自发地产生位错。也就是说，位错只是由其他位错而产生。

③杂质的分凝在晶体的末端会导致某些位错的产生。

基于上述分析，所以达希主张严格地挑选籽晶，要求尽可能低位错密度的籽晶或无位错的籽晶。要求籽晶的端部为小直径的长圆锥而能减少位错数目的遗传。并对籽晶表面作严格