

Analiza defektów występujących w strukturze krzemu na podstawie obserwacji taśm krzemowych otrzymywanych metodą EFG

(część 1)

W ostatnich latach w Wojskowej Akademii Technicznej i w Instytucie Technologii Materiałów Elektronowych prowadzi się badania nad technologią otrzymywania taśm krzemowych metodą EFG [1] – [3]. Na obecnym etapie tych prac otrzymuje się taśmy o znacznym zdefektowaniu struktury.

Na podstawie obserwacji struktury i morfologii taśm krzemowych otrzymanych metodą EFG autorzy starali się ukazać w niniejszym artykule defekty struktury występujące w kryształach krzemu. Ich praca składa się z dwóch części: w pierwszej przedstawiono modele typowych defektów struktury krystalicznej krzemu, w drugiej natomiast ukazano identyfikację tych defektów, dokonane przez autorów przy wykorzystaniu metodyki mikroskopu optycznego i SEM.

Niniejszy artykuł stanowi pierwszą część pracy. Druga zostanie umieszczona w następnym numerze kwartalnika *Materiały Elektroniczne*.

1. TYPOWE DEFEKTY WYSTĘPUJĄCE W STRUKTURZE KRZEMU

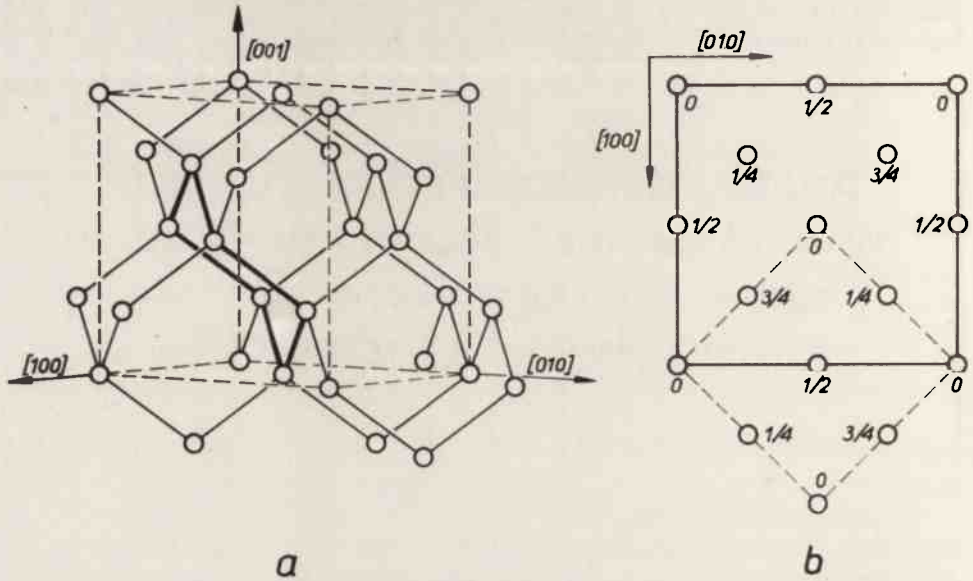
1.1. Struktura krzemu

Krzem posiada sieć regularną typu diamentu (A4). Ten sam typ sieci posiada również german i cyna szara. W strukturze tego typu występuje wiązanie czysto kowalencyjne, które jest wiązaniem kierunkowym, a kąty pomiędzy kierunkami wszystkich wiązań są jednakowe. Wynika to z faktu, że każdy atom posiada cztery jednakowo silne wiązania międzycząsteczkowe.

Rozmieszczenie atomów w sieci typu diamentu przedstawiono na rys. 1a. Można na nim zaobserwować, że wszystkie kierunki wiązań łączących atomy należą do typu $\langle 111 \rangle$.

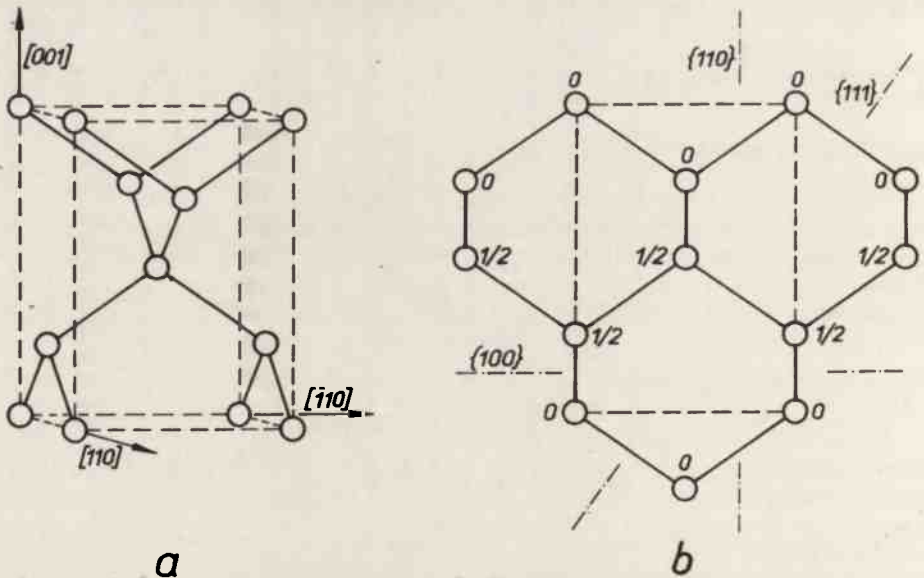
Na rysunku 1a w sieć krzemu wrysowano *regularną komórkę elementarną*. Krawędzie tej komórki należą do typu $\langle 100 \rangle$. Grubą linią zaznaczono na rysunku wygięty sześciobok, powtarzający się w sieci. Konfigurację atomową tego typu nazwano *konfiguracją krzeselkową* (ang. *chair form*) [4], [5]. W pracy będzie również mowa o drugiej możliwej konfiguracji sześciocząsteczkowej, występującej w przypadku pojawienia się w strukturze krzemu dyslokacji śrubowej. Konfigurację tę, z uwagi na charakterystyczny kształt wygiętego sześcioboku, nazwano konfiguracją łódkową (ang. *boat form*) [4], [5].

Na rysunku 1b przedstawiono rzut cechowany struktury typu diamentu na podstawie komórki elementarnej z rys. 1a.



Rys. 1a. Rozmieszczenie atomów w sieci regularnej typu diamentu; linią przerywaną wrysowano krawędzie regularnej komórki elementarnej
b. Rzut cechowany struktury typu diamentu na podstawie komórki elementarnej [4]

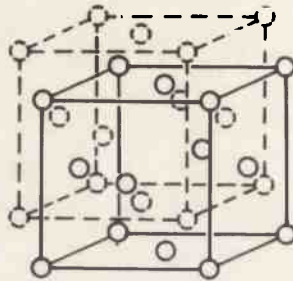
Siec krzemu można również przedstawić posługując się *elementarną komórką tetragonalną* [4], [6]. Komórkę taką przedstawiono na rys. 2a. W tym przypadku krawędziami komórki sieciowej są proste sieciowe $[110]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$ i $[001]$.



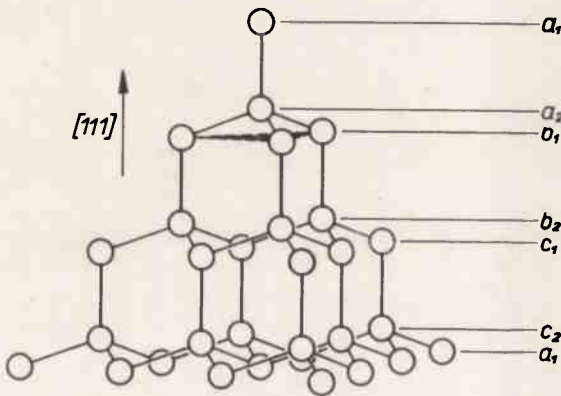
Rys. 2a. Elementarne komórki tetragonalne sieci typu diamentu
b. Rzut komórki z rys. 2a na płaszczyznę (110) [4]

Rzut cechowany komórki tetragonalnej na płaszczyznę $(1\bar{1}0)$ przedstawia rys. 2b. Na rysunku 1b linią przerywaną zaznaczono rzut komórki tetragonalnej na płaszczyznę (001) . Można na nim również zaobserwować sposób przejścia od regularnej komórki sieciowej do komórki tetragonalnej.

Podany w oznaczeniach międzynarodowych symbol grupy przestrzennej – $Fd3m$ [7] – mówi, że krzem posiada sieć Bravais typu F (o centrowanych ścianach), należy do klasy $m3m$, a równoległe do płaszczyzn typu $\{100\}$ występują płaszczyzny ślizgowe o symbolu d [6]. Z faktu istnienia tych płaszczyzn wynika sposób przedstawienia sieci krzemu jako dwóch przenikających się sieci ściennie centrowanych należących do układu regularnego, przesuniętych względem siebie o wektor o składowych $[1/4, 1/4, 1/4]$ (rys. 3). Z faktem tym wiąże się również szczególne rozmieszczenie płaszczyzn (111) w sieci krzemu (rys. 4) [8].



Rys. 3. Przedstawienie sieci typu diamentu w postaci dwóch przenikających się wzajemnie płaskocentrowanych sieci regularnych, przesuniętych względem siebie o wektor o składowych $[1/4, 1/4, 1/4]$

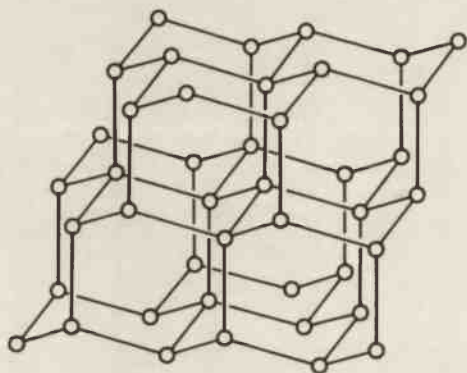


Rys. 4. Ułożenie par płaszczyzn (111) w sieci typu diamentu

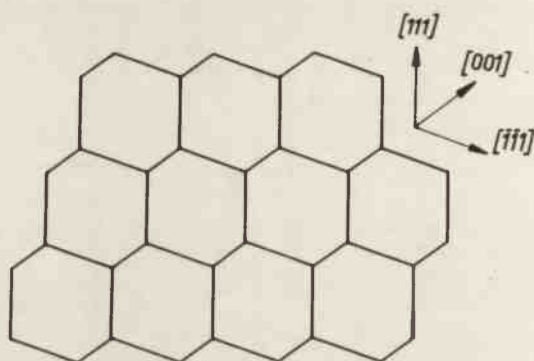
Płaszczyzny oznaczone literami a_1, b_1, c_1, \dots pochodzą od jednej komórki elementarnej ściennie centrowanej układu regularnego, natomiast płaszczyzny oznaczone przez a_2, b_2, c_2, \dots – od drugiej komórki, przesuniętej względem pierwszej o wektor $[1/4, 1/4, 1/4]a$, gdzie a jest długością krawędzi komórki elementarnej. Jak widać na rysunku płaszczyzny te są przemieszane, tworząc kolejność $a_1, a_2, b_1, b_2, c_1, c_2, a_1, a_2, \dots$, i są zbliżone do siebie parami. Występowanie takich par płaszczyzn ma podstawowe znaczenie przy powstawaniu defektów w strukturze.

W rozważaniach na temat defektów w strukturze występujących w kryształach krzemu najczęściej stosuje się przedstawienie sieci krystalicznej sposobem pokazanym na rys. 5a i 5b.

Siec z rys. 5a odpowiada obrotowi sieci z rys. 1a w taki sposób, że jeden z kierunków wiązań jest pionowy. Rzutując następnie tę sieć na płaszczyznę (110) otrzymujemy



a



b

Rys. 5a. Sieć typu diamentu trójwymiarowa, kierunek $[111]$ – pionowy. b. Sieć typu diamentu dwuwymiarowa, powstała przez rzutowanie sieci z rys. 5a na płaszczyznę (110) $[4]$

dwuwymiarowy schemat sieci pokazany na rys. 5b. Postępując się schematami z rys. 5 można przedstawić wszystkie defekty struktury występujące w krzemie i w germanie.

W następnych częściach tego rozdziału zostaną omówione podstawowe defekty struktury spotykane w taśmach krzemowych, tj.: dyslokacje, granice bliźniacze, granice lamellarne (lamelle bliźniacze), błędy ułożenia.

1.2. Dyslokacje w sieci krzemu

Zagadnieniem występowania dyslokacji w strukturze krzemu i w innych materiałach posiadających sieć typu diamentu, zajmował się J. Hornstra $[4]$ i H.G. van Bueren $[5]$. W pracach obu autorów znajduje się charakterystyka możliwych typów dyslokacji występujących w krzemie. Za podstawę do klasyfikacji uznano kąt jaki tworzy linia dyslokacji z jej wektorem Burgersa. Podstawowe typy dyslokacji omówiono również w książce $[6]$.

Najkrótszymi wektorami translacyjnymi w sieci krzemu są wektory $a/2 \langle 110 \rangle$, które łączą dwa położone najbliżej siebie atomy krystalograficznie równoważne (zob. $[6]$). Wektory $a/2 \langle 110 \rangle$ są jednocześnie dozwolonymi wektorami Burgersa w sieci typu diamentu. W literaturze rozważa się dyslokacje tylko z tymi wektorami Burgersa, gdyż są one najbardziej stabilne. Dyslokacje z wektorami Burgersa $a/2 \langle 110 \rangle$ są *dyslokacjami doskonałymi* w sieci typu diamentu.

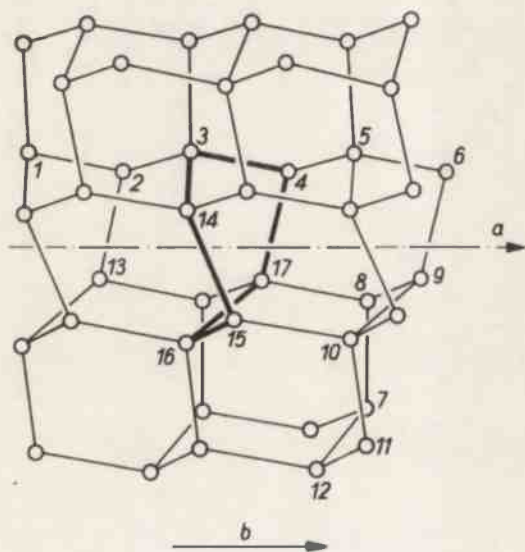
Gdy linią takiej dyslokacji jest prosta sieciowa o kierunku typu $\langle 110 \rangle$, mamy do czynienia z dyslokacją prostą. Dyslokację, której linia dyslokacji nie należy do kierunku typu $\langle 110 \rangle$, określamy jako dyslokację złożoną.

1.2.1. Dyslokacje proste

Do tej grupy należy zaliczyć dyslokacje doskonałe, których linia dyslokacji jest prostą sieciową typu $\langle 110 \rangle$. Ponieważ wektor Burgersa posiada kierunek należący również do typu $\langle 110 \rangle$ można wyróżnić trzy typy dyslokacji prostych:

- (1) dyslokacja śrubowa,
- (2) dyslokacja 60-stopniowa,
- (3) dyslokacja krawędziowa.

Dyslokacja śrubowa. Wektor Burgersa w tym typie dyslokacji jest równoległy do linii dyslokacji. Deformację sieci krzemu w wyniku pojawienia się w niej dyslokacji śrubowej przedstawiono na rys. 6. Zaznaczono na nim nie zdeformowany, zamknięty sześciobok 7-8-9-10-11-12-7 oraz strukturę odkształconą 13-2-3-14-15-16-17 o kształcie śrubowym. Wektor 13-17, który charakteryzuje odkształcenie sieci, jest wektorem Burgersa dyslokacji śrubowej.



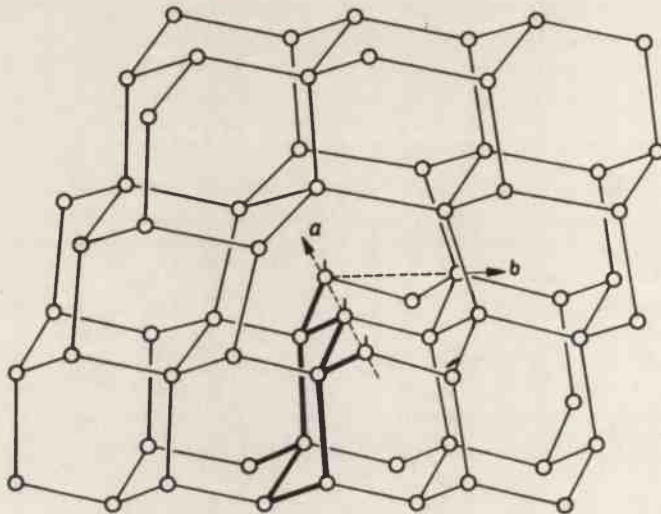
Rys. 6. Dyslokacja śrubowa w strukturze typu diamentu wg [4]
a – linia dyslokacji, b – wektor Burgersa dyslokacji

Na rysunku 6 grubszą linią zaznaczono konfigurację sześciopięciową o charakterystycznym dla dyslokacji śrubowej kształcie. Przypomina on swym wygięciem łódkę, dlatego konfigurację taką nazwano *konfiguracją łódkową* (ang. *boat form*) [4].

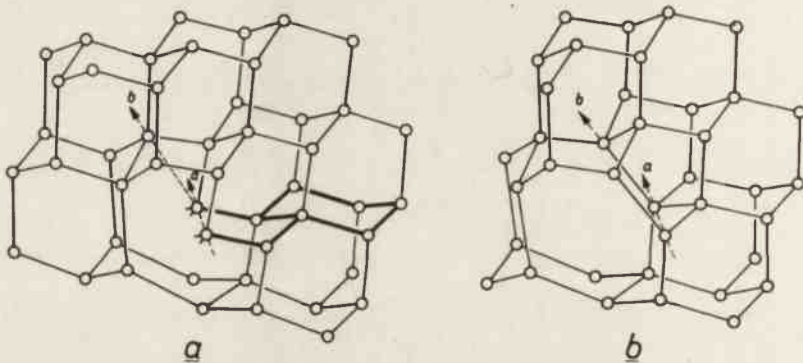
Dyslokację 60-stopniową pokazano na rys. 7. Wektor Burgersa tworzy w tym przypadku z linią dyslokacji kąt 60° , a jej płaszczyzną poślizgu jest płaszczyzna typu $\{111\}$.

W przypadku dyslokacji 60-stopniowej przeważa składowa krawędziowa, o czym świadczy istnienie podwójnej ekstrapłaszczyzny typu $\{111\}$, zaznaczonej na rysunku grubą linią. Składowa śrubowa tej dyslokacji jest stosunkowo mała.

W przeciwieństwie do śrubowej dyslokacja ta jest czynna elektrycznie. Na skutek pojawienia się jednego wolnego wiązania przy każdym atomie znajdującym się na krawędzi ekstrapłaszczyzny, staje się ona aktywnym centrum akceptorowym, różniącym się od centrów akceptorowych powstałych w wyniku wprowadzenia domieszki z III grupy układu okresowego [9].



Rys. 7. Dyslokacja 60-stopniowa w strukturze typu diamentu wg [4]
a – linia dyslokacji, *b* – wektor Burgersa dyslokacji



Rys. 8. Prosta dyslokacja krawędziowa w strukturze typu diamentu wg [4]
a – linia dyslokacji, *b* – wektor Burgersa dyslokacji

Dyslokacja krawędziowa. Wektor Burgersa tej dyslokacji tworzy z linią dyslokacji kąt 90° . Płaszczyzną poślizgu jest płaszczyzna typu $\{100\}$.

Dwie konfiguracje dyslokacji krawędziowej przedstawiono na rys. 8. Linią przedstawionej tu dyslokacji jest prosta sieciowa $[110]$. Jej wektor Burgersa leży na prostej sieciowej $[110]$, a płaszczyzną poślizgu jest płaszczyzna sieciowa (001) .

W przypadku pokazanym na rys. 8a przy każdym atomie znajdującym się na granicy ekstrapłaszczyzny są widoczne dwa wolne wiązania. Konfiguracja pokazana na rys. 8b nie posiada wolnych wiązań, posiada natomiast pięcio- i siedmioatomowe pierścienie, co sprawia, że jest ona bardziej stabilna. Jednak przejście z jednej konfiguracji w drugą jest możliwe tylko w dostatecznie wysokich temperaturach, poprzez dyfuzję wakansów lub atomów międzywęzłowych.

Omówione wyżej typy dyslokacji prostych zestawiono w tabl. 1.

TABLICA 1. Typy dyslokacji prostych (z wektorami Burgersa $a/2 \langle 110 \rangle$) występujących w sieci typu diamentu wg [4]

Typ dyslokacji	Linia dyslokacji	Kąt między linią dyslokacji i jej wektorem Burgersa	Płaszczyzna poślizgu
dyslokacja śrubowa	$\langle 110 \rangle$	0°	-
dyslokacja 60-stopniowa	$\langle 110 \rangle$	60°	{111}
dyslokacja krawędziowa	$\langle 110 \rangle$	90°	{100}

1.2.2. Dyslokacje złożone

Są to dyslokacje, których linią dyslokacji jest prosta sieciowa różna od $\langle 110 \rangle$ (oczywiście w dalszym ciągu rozpatrujemy tylko dyslokacje o wektorach Burgersa $a/2 \langle 110 \rangle$).

Traktując dyslokację jako wektor biegnący wzdłuż linii dyslokacji, dyslokację złożoną można przedstawić w postaci sumy wektorów jednostkowych reprezentujących dyslokacje proste. J. Hornstra rozpatrzył wszystkie możliwe typy dyslokacji złożonych posiadających wektory Burgersa $a/2 \langle 110 \rangle$ i będących sumą dwóch dyslokacji prostych [4], [5], wyróżniając sześć takich dyslokacji. Wymieniono je w tabl. 2, podając również podstawowe informacje o każdej z nich tj. symbol linii dyslokacji, kąt między linią dyslokacji i jej wektorem Burgersa oraz symbol płaszczyzny poślizgu dyslokacji. Możliwe sumy dyslokacji prostych, na które można rozłożyć poszczególne dyslokacje złożone można znaleźć w pracy [4].

TABLICA 2. Typy dyslokacji złożonych (z wektorami Burgersa $a/2 \langle 110 \rangle$) występujących w sieci typu diamentu, wg [4]

Typ	Linia dyslokacji	Kąt między linią dyslokacji i jej wektorem Burgersa	Płaszczyzna poślizgu	Nr rysunku, na którym przedstawiono model dyslokacji
I	$\langle 211 \rangle$	30°	{111}	9
II	$\langle 211 \rangle$	90°	{111}	10
III	$\langle 211 \rangle$	$73^\circ 13'$	{311}	-
IV	$\langle 211 \rangle$	$54^\circ 44'$	{110}	-
V	$\langle 100 \rangle$	90°	{110}	11
VI	$\langle 100 \rangle$	45°	{100}	-

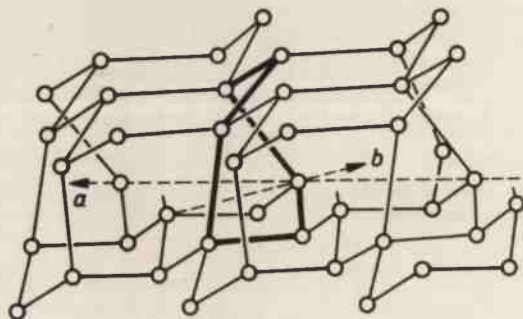
Na rysunku 9 przedstawiono *dyslokację złożoną I typu*, którą nazwano dyslokacją 30-stopniową. Przeważa w niej składowa śrubowa, o czym świadczy widoczna na rysunku konfiguracja łożkowa. Dyslokacja ta posiada wolne wiązania.

Na rysunku 10 jest widoczna *dyslokacja złożona II typu*. Jest to dyslokacja krawędziowa. W jej obszarze znajduje się dwa razy więcej atomów posiadających wolne wiązania niż w obszarze dyslokacji 30-stopniowej.

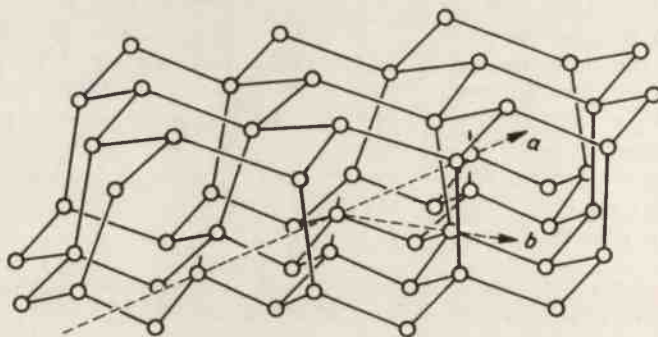
Dyslokacje złożone I i II typu mają tę samą płaszczyznę poślizgu co dyslokacja 60-stopniowa. Mogą one występować w pętłach generowanych ze źródeł Franka-Reada na płaszczyznach typu {111} oraz w postaci zakrzywionych pętli dyslokacyjnych.

Na uwagę zasługuje jeszcze *dyslokacja typu V*, pokazana na rys. 11. Jest to dyslokacja krawędziowa. Jej linia dyslokacji leży w kierunku [001], a płaszczyzną poślizgu jest płaszczyzna (110). Ten typ dyslokacji złożonej można spotkać w obszarze wąskokątowej granicy ziarn. Stwierdził to F.L. Vogel, badając granicę wąskokątową w kryształach germanu [10].

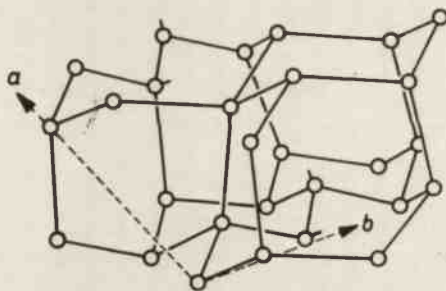
Schematy pozostałych typów dyslokacji można znaleźć w pracach [4], [5].



Rys. 9. Dyslokacja 30-stopniowa w strukturze typu diamentu wg [4]
a – linia dyslokacji, *b* – wektor Burgersa dyslokacji



Rys. 10. Złożona dyslokacja krawędziowa posiadająca płaszczyznę poślizgu typu (111) wg [4]
a – linia dyslokacji, *b* – wektor Burgersa dyslokacji



Rys. 11. Złożona dyslokacja krawędziowa, której linią dyslokacji jest prosta sieciowa typu (001), a płaszczyzną poślizgu płaszczyzna sieciowa typu (110) wg [4]
a – linia dyslokacji, *b* – wektor Burgersa dyslokacji

1.3. Granice bliźniacze

Proces bliźniakowania występujący podczas wzrostu kryształu jest naturalną drogą pochłonięcia nadmiaru energii wydzielającej się podczas wzrostu lub w innych procesach cieplnych związanych z dużymi gradientami temperatury [11].

Znane są dwie możliwości powstawania bliźniaków [12]: podczas wzrostu (pierwotne granice bliźniacze) oraz w fazie stałej (wtórne granice bliźniacze).

Powstawanie granic bliźniaczych w fazie stałej jest powodowane dużymi naprężeniami towarzyszącymi zmianie objętości krzemu podczas krzepnięcia (5-10%) [12].

W kryształach wyciąganych z cieczy tego rodzaju mechanizm nie występuje, gdyż kryształ rośnie swobodnie i nie ma żadnych ścianek ograniczających zwiększanie jego objętości. Naprężenia, jakie tu występują, są naprężeniami wynikłymi z istnienia granicy ciecz-ciało stałe, określonej przez matrycę kształtu menisku. Można przypuszczać, że przy dużych szybkościach wzrostu, z jakimi spotykamy się w metodzie EFG, pewną rolę w tworzeniu się pierwotnych granic bliźniaczych odgrywają również naprężenia termiczne, powodowane dużymi gradientami temperatury.

Pierwotne granice bliźniacze powstają bezpośrednio podczas wzrostu kryształu z cieczy, tj. podczas osadzania się pojedynczych warstw atomowych.

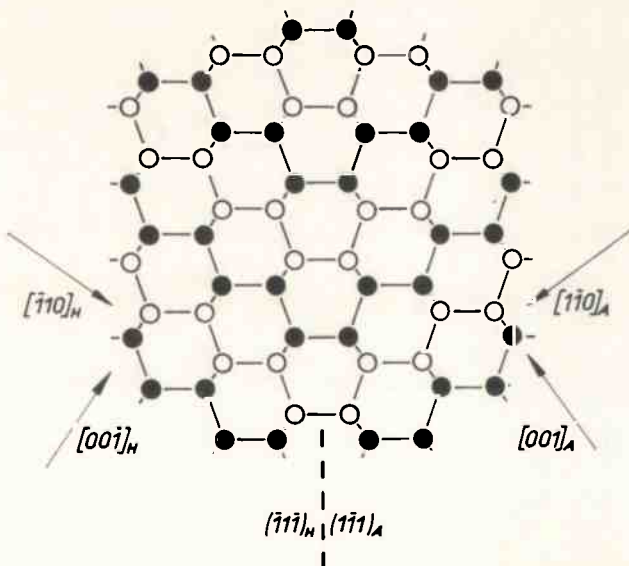
Analizą strukturalną granic bliźniaczych zajmował się Kohn [13], [14] i Hornstra [15]. Kohn w pracy [14] wyróżnił następujące granice bliźniacze:

- granice bliźniacze 1 rzędu: prosta (koherentna) granica bliźniacza (ang. *simple (coherent) twin boundary*); lateralna (półkoherentna) granica bliźniacza (ang. *lateral (semicoherent) twin boundary*),
- granice bliźniacze 2 rzędu (ang. *2nd-order twin boundaries*),
- granice bliźniacze 3 rzędu (ang. *3rd-order twin boundaries*),
- granice bliźniacze wyższych rzędów.

Poniżej na podstawie klasyfikacji zaproponowanej przez Kohna, zostaną omówione poszczególne granice bliźniacze z przedstawieniem modelu każdej z nich. Do rozważań posłuży dwuwymiarowy schemat sieci krzemu (zob. rys. 5b).

1.3.1. Granice bliźniacze 1 rzędu

Prosta (koherentna) granica bliźniacza. Jest to najczęściej spotykana i najlepiej zbadana granica bliźniacza. Jej model można przedstawić posługując się rzutem sieci krzemu na płaszczyznę $(\bar{1}\bar{1}0)$ (rys. 12), a trójwymiarowy model podano w pracy [16]. Podstawową własnością tej granicy jest pokrywanie się płaszczyzny bliźniaczej z płaszczyzną granicy przez co granica ta jest granicą koherentną.



Rys. 12. Prosta (koherentna) granica bliźniacza w strukturze typu diamentu; rzut na płaszczyznę $(\bar{1}\bar{1}0)$

Płaszczyzną prostej granicy bliźniaczej jest zawsze płaszczyzna typu $\{111\}$. Bardzo istotny dla tej granicy jest brak dyslokacji w jej obszarze [16]. Sieć kryształu z jednej strony granicy bliźniaczej jest lustrzanym odbiciem jego sieci z jej drugiej strony. Bliźniakowanie typu $\{111\}$ daje doskonałe dopasowanie sieci krystalicznych po obu stronach granicy bliźniaczej, tzn. zapewnia stałość odległości międzypłaszczyznowych, zachowując przy tym kąt wiązań międzyatomowych. Proces generacji takiej granicy bliźniaczej pochłania, dzięki temu, bardzo małą ilość energii, która jest potrzebna jedynie do zainicjowania wzajemnego oddziaływania między atomami sąsiednich bloków [12]. Ta mała ilość energii pochłanianej w procesie bliźniakowania jest przyczyną częstszego występowania granic bliźniaczych typu $\{111\}$.

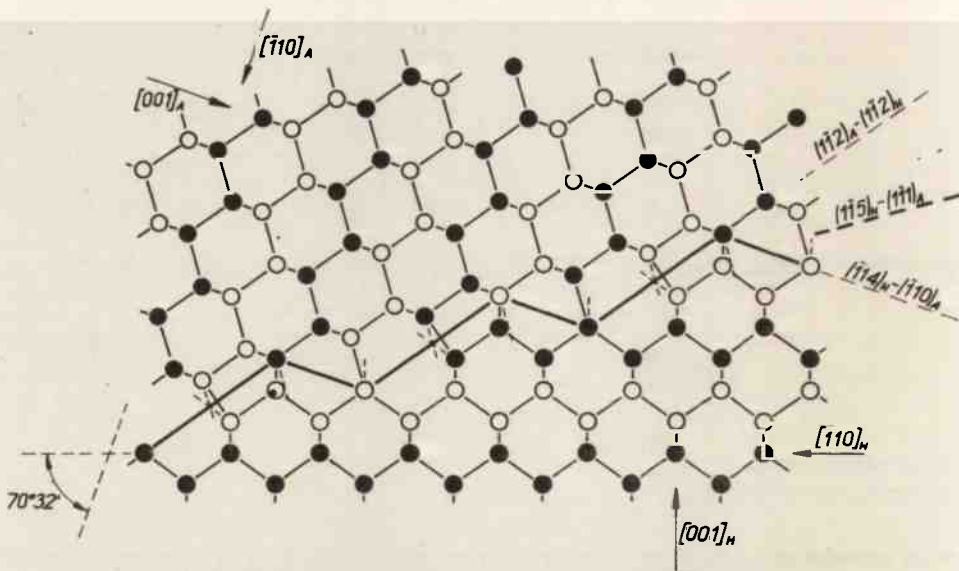
Prostą granicę bliźniaczą można interpretować jako obrót o kąt $70^\circ 32'$ wokół osi typu $\langle 110 \rangle$ [14], [15].

Lateralne granice bliźniacze

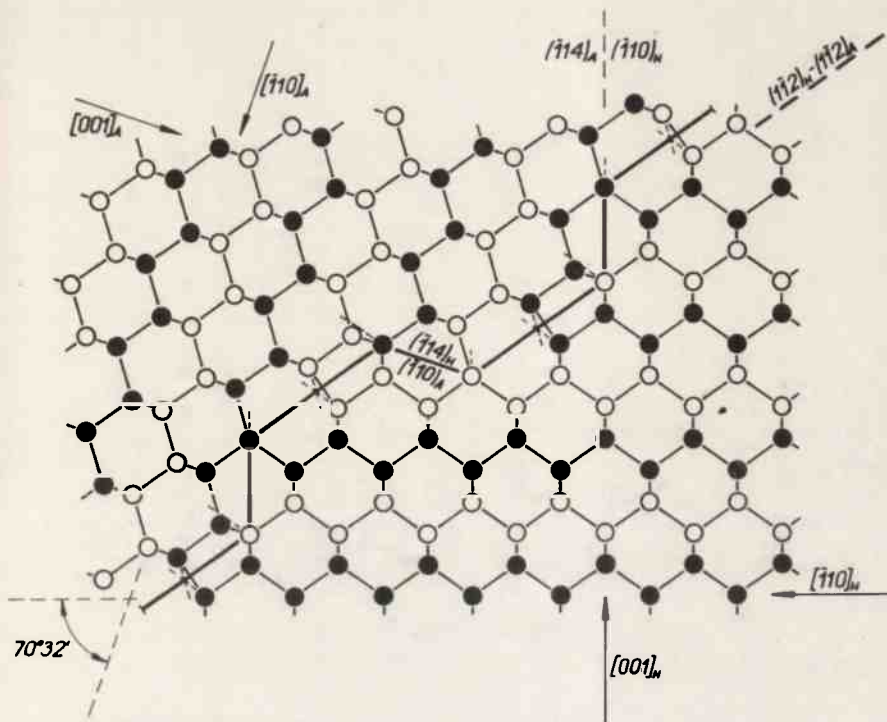
Typem granicy bliźniaczej 1 rzędu, dla której płaszczyzna bliźniacza nie pokrywa się z płaszczyzną granicy bloków (ang. *boundary plane* lub *composition plane*), jest lateralna granica bliźniacza (ang. *lateral twin boundary*), nazywana również półkoherentną granicą bliźniaczą (ang. *semicoherent twin boundary*). Utworzenie granicy tego typu wymaga większej ilości energii, niż potrzeba jej do utworzenia prostej granicy bliźniaczej.

Kohn wyróżnił w sieci typu diamentu cztery lateralne granice bliźniacze typu $\langle hhl \rangle$. Wszystkie te granice zaobserwował w krzemie [14]. Poszukując modelu struktury tych granic dążył do tego by uzyskać najwyższy stopień dopasowania sieci i duży stopień koincydencji w sąsiadujących blokach. W związku z tym założył model granicy składający się z segmentów, osiągając w ten sposób lepsze dopasowanie sieci i otrzymał granicę w kształcie „zygzaka”. Taka kombinacja segmentów stworzyła możliwość utworzenia granicy o najmniejszej energii.

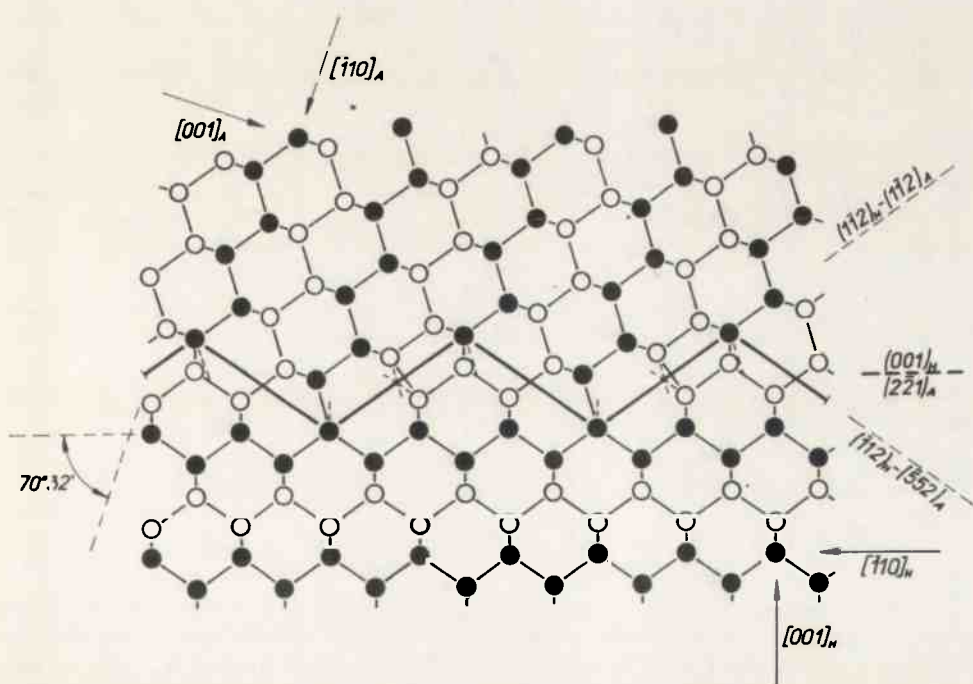
Na rysunkach 13-16 przedstawiono zaproponowane przez Kohna modele omawianych granic. Grubszą linią zaznaczono na nich kierunki poszczególnych segmentów wchodzących w skład granicy, a przerywaną – odkształcenie wiązań. W tabelicy 3 wymieniono poszczególne granice lateralne i segmenty, z których są one zbudowane.



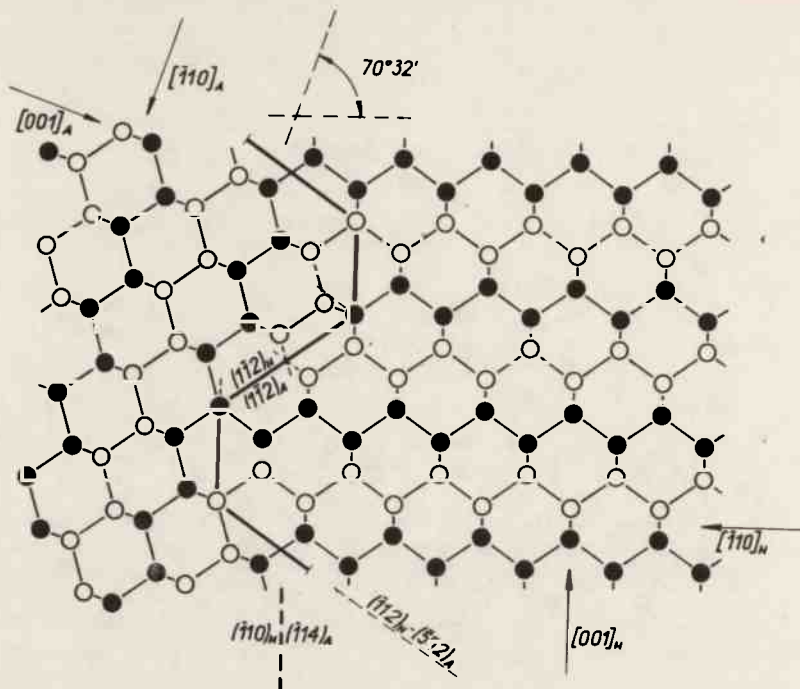
Rys. 13. Lateralna granica bliźniacza typu $\langle 115 \rangle - \langle 111 \rangle$ w strukturze diamentu, wg [14]



Rys. 14. Lateralna granica bliźniacza typu $(112) - (112)$ w strukturze typu diamentu, wg [14]



Rys. 15. Lateralna granica bliźniacza typu $(001) - (221)$ w strukturze diamentu, wg [14]



Rys. 16. Lateralna granica bliźniacza typu (110) - (114) w strukturze typu diamentu, wg [14]

TABLICA 3. Lateralne granice bliźniacze typu $(h\bar{h}l)$ występujące w sieci typu diamentu, wg Kohna [14]

Oznaczenie ogólne granicy	Oznaczenie na rysunku	Segmety wchodzące w skład granicy	Nr rysunku	Uwagi
$\{115\} - \{111\}$	$(\bar{1}\bar{1}5)_H - (\bar{1}\bar{1}1)_A$	$(1\bar{1}\bar{2})_H - (\bar{1}\bar{1}2)_A$ $(\bar{1}\bar{1}4)_H - (\bar{1}\bar{1}0)_A$	13	
$\{112\} - \{112\}$	$(\bar{1}\bar{1}2)_H - (\bar{1}\bar{1}2)_A$	$(\bar{1}\bar{1}0)_H - (\bar{1}\bar{1}4)_A$ $(1\bar{1}2)_H - (\bar{1}\bar{1}2)_A$ $(\bar{1}\bar{1}4)_H - (\bar{1}\bar{1}0)_A$	14	granice tę zaobserwował również Salkovitz i von Batchelder [17]
$\{001\} - \{221\}$	$(001)_H - (2\bar{2}1)_A$	$(1\bar{1}2)_H - (\bar{1}\bar{1}2)_A$ $(\bar{1}\bar{1}2)_H - (\bar{5}52)_A$	15	
$\{110\} - \{114\}$	$(\bar{1}\bar{1}0)_H - (\bar{1}\bar{1}4)_A$	$(1\bar{1}2)_H - (\bar{1}\bar{1}2)_A$ $(\bar{1}\bar{1}0)_H - (\bar{1}\bar{1}4)_A$ $(\bar{1}\bar{1}2)_H - (\bar{5}52)_A$	16	

Symbol granicy lateralnej i segmentów, z jakich jest ona utworzona, składa się z dwóch części. Pierwsza z nich, z indeksem H , jest symbolem płaszczyzny granicy (bądź segmentu) w odniesieniu do niezbliźnionego kryształu. Druga, z indeksem A , jest symbolem płaszczyzny granicy (bądź segmentu) w odniesieniu do części kryształu utworzonego po zbliźnieniu.

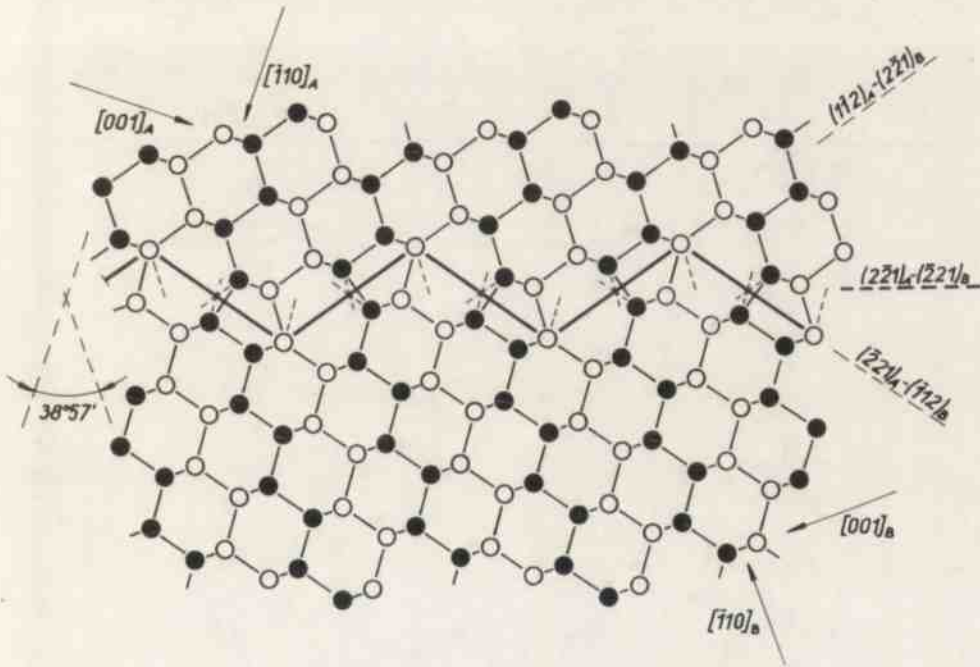
Cechą, która łączy bliźniacze granice lateralne z prostą granicą bliźniaczą, jest możliwość przekształcania sieci kryształu z jednej strony granicy – w jego sieć z jej drugiej strony przez obrót wokół osi typu $\langle 110 \rangle$ o kąt $70^\circ 32'$, co również zaznaczono na rysunkach.

1.3.2. Granice bliźniacze 2 rzędu

Przekształcenie sieci kryształu przez granicę bliźniaczą 2 rzędu można interpretować jako obrót sieci wokół osi typu $\langle 110 \rangle$ o kąt $38^\circ 57'$. Granica ta może powstać pomiędzy blokami kryształu, które utworzyły się w wyniku działania dwóch nierównoległych do siebie granic bliźniaczych typu $\{111\}$ [13].

Posługując się tymi samymi założeniami, co przy tworzeniu modelu granicy lateralnej, Kohn stwierdził, że istnieją trzy niskoenergetyczne granice bliźniacze 2 rzędu typu $\{hhl\}$ [14]. Dwie z nich zidentyfikował w krzemie.

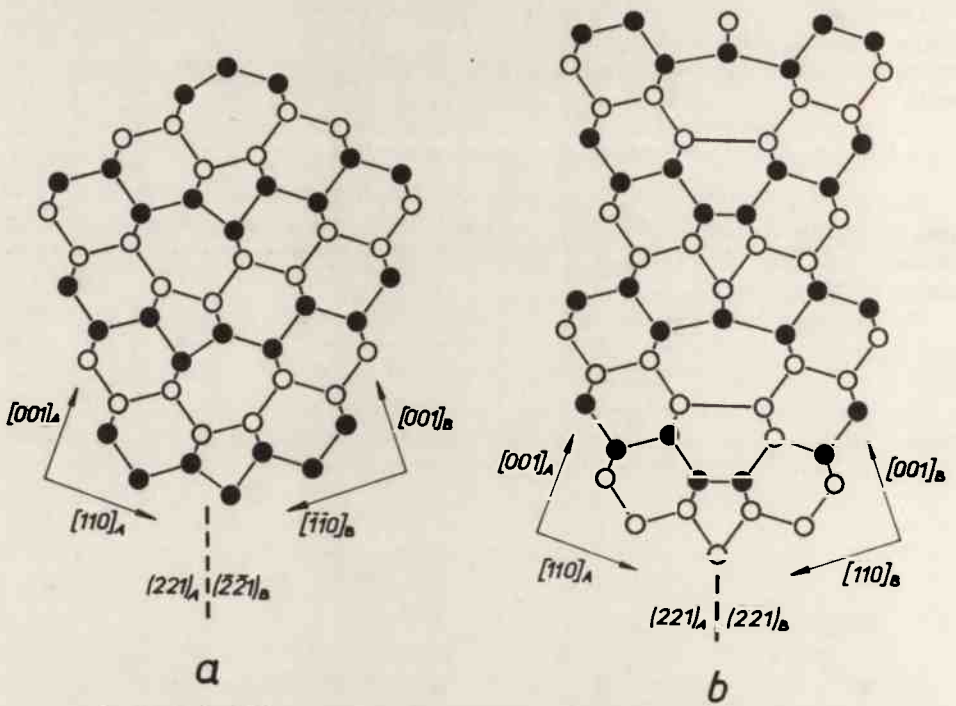
Rysunki 17, 19 i 20 przedstawiają zaproponowane przez Kohna modele tych granic. Podobnie jak poprzednio grubą linią zaznaczono kierunki poszczególnych segmentów, a linią przerywaną – odkształcenie wiązań międzyatomowych.



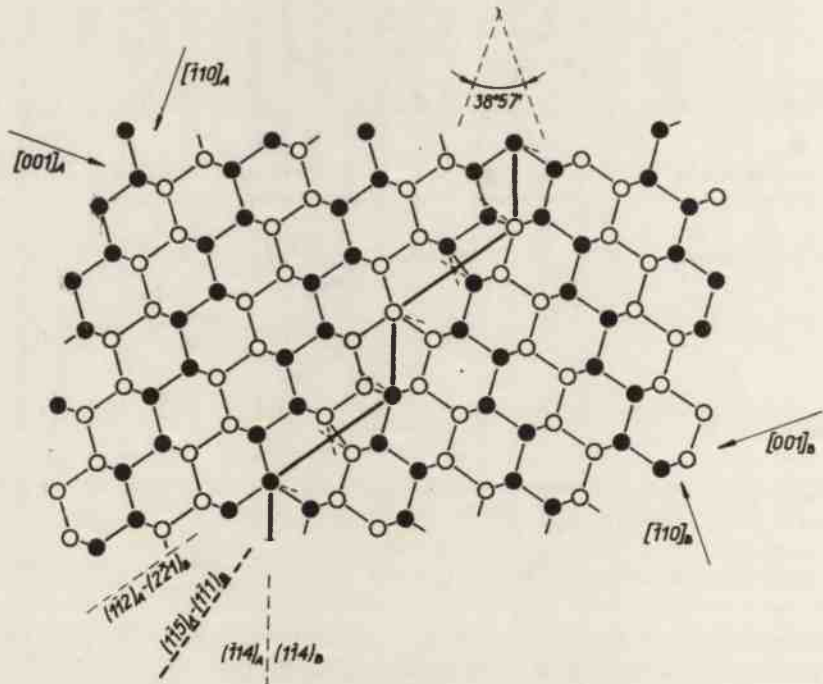
Rys. 17. Granica bliźniacza 2 rzędu typu $\{221\} - \{221\}$ w strukturze typu diamentu, wg [14]

W tabelicy 4 zestawiono przedstawione wyżej granice. Zawarto w niej symbole segmentów, z jakich są zbudowane poszczególne granice. Symbole z indeksem *A* odnoszą się, podobnie jak poprzednio, do bloków kryształu powstałych w wyniku bliźniakowania 1 rzędu. Symbole z indeksem *B* – do bloków kryształu utworzonych w wyniku bliźniakowania 2 rzędu.

Według Hornstra granica bliźniacza jest szczególnym przypadkiem granicy ziaren, utworzonej przez regularnie ułożone dyslokacje [15]. Podał on dwa dyslokacyjne modele granicy bliźniaczej 2 rzędu typu $\{221\} - \{221\}$. Konstruując model dążył on do maksymalnej gęstości dyslokacji wzdłuż granicy [15]. Pierwszy jego model, przed-



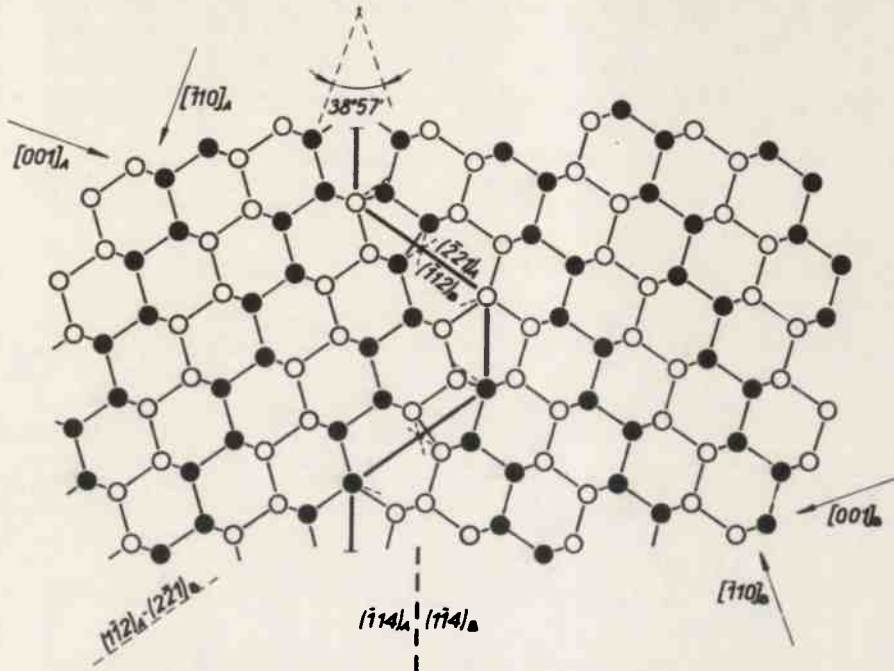
Rys. 18. Grznice bliźniacze 2 rzędu typu (221) - (221) w strukturze typu diamentu, wg [15]
 a - model z zygzakowato ułożonymi dyslokacjami, b - model z „podwójnymi” dyslokacjami



Rys. 19. Granica bliźniacze 2 rzędu typu (115) - (111) w strukturze typu diamentu, wg [14]

stawiony na rys. 18a, jest identyczny z modelem Kohna (por. rys. 17) W tym modelu autor zakłada zygzakowate ułożenie dyslokacji.

W drugim modelu (rys. 18b) zwiększenie gęstości dyslokacji wzdłuż granicy, Hornstra uzyskał przez utworzenie tzw. *podwójnej dyslokacji* (ang. *double dislocation*). Przekształcił mianowicie model z rys. 18a w taki sposób, by dyslokacje zachodziły na siebie.



Rys. 20. Granica bliźniacza 2 rzędu typu $(114) - (114)$ w strukturze typu diamentu, wg [14]

TABLICA 4. Granice bliźniacze 2 rzędu typu (hh) występujące w sieci typu diamentu, wg Kohna [14]

Oznaczenie ogólne granicy	Oznaczenie na rysunku	Segmenty wchodzące w skład granicy	Nr rysunku	Uwagi
$\{221\} - \{221\}$	$(221)_A - (221)_B$	$(1\bar{1}2)_A - (221)_B$ $(221)_A - (112)_B$	17	
$\{115\} - \{111\}$	$(1\bar{1}5)_A - (1\bar{1}1)_B$	$(1\bar{1}2)_A - (2\bar{2}1)_B$ $(\bar{1}14)_A - (\bar{1}14)_B$	19	nie zaobserwowano w krzemie
$\{114\} - \{114\}$	$(1\bar{1}4)_A - (\bar{1}14)_B$	$(112)_A - (\bar{2}21)_B$ $(\bar{1}14)_A - (\bar{1}14)_B$ $(221)_A - (112)_B$	20	

Założenia Kohna i Hornstra różnią się od siebie: Kohn w swym modelu nie uwzględnił przesunięć atomów ze swoich miejsc przed odbudową wiązań [14], dopuszczając jedynie odkształcenie niektórych wiązań międzyatomowych. Nie uwzględnił również dyslokacji tworzących granicę. Natomiast Hornstra potraktował granicę

bliźniaczą jako szczególny przypadek granicy nachylonej z równoległymi do jej osi, położonymi blisko siebie dyslokacjami [15].

1.3.3. Granice bliźniacze 3 rzędu

Ten typ granicy bliźniaczej można traktować jako obrót sieci wokół osi typu $\langle 110 \rangle$ o kąt $31^\circ 35'$. Jest to granica, która charakteryzuje się mniejszym stopniem koincydencji niż granica 2 rzędu, dlatego też utworzenie jej wymaga większej ilości energii.

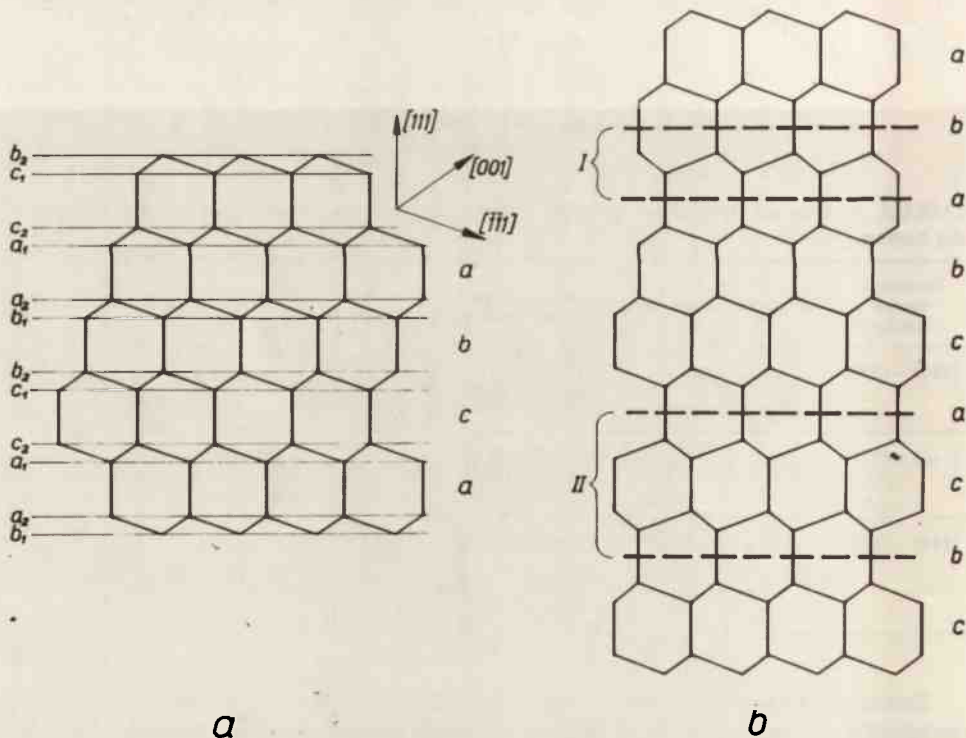
Model granicy bliźniaczej 3 rzędu jest bardzo skomplikowany. Można go sobie wyobrazić syntetyzując modele podane przez Hornstra [15].

Z dotychczasowych rozważań wynika, że im wyższy rząd granicy bliźniaczej, tym mniejszy stopień koincydencji i tym większa energia potrzebna do jej utworzenia. Zgodnie z tymi rozważaniami granica bliźniacza 4 rzędu jest już wysokoenergetyczną, niekoherentną granicą ziaren.

1.4. Błędy ułożenia

Błędy ułożenia w sieci typu diamentu przedstawił Hornstra [4]. Wykorzystał on w swej pracy wyniki rozważań Franka i Nicholasa [18] dotyczące błędów ułożenia w sieci regularnej ściennie centrowanej.

W strukturze typu diamentu kolejność płaszczyzn typu $\{111\}$ można wyrazić następująco: $a_1, a_2, b_1, b_2, c_1, c_2, a_1, a_2, \dots$. Mamy tu do czynienia nie z pojedynczymi płaszczyznami typu $\{111\}$ (jak w przypadku sieci regularnej ściennie centrowanej) ale z parami płaszczyzn (zob. rys. 4 i 5). Dlatego też Hornstra wprowadził pewne uproszczenie zastępując parę płaszczyzn jedną płaszczyzną leżącą pomiędzy nimi, np. parę płaszczyzn a_1, a_2 – płaszczyzną a (zob. rys. 21a).



Rys. 21 a. Kolejność par płaszczyzn $\{111\}$ w strukturze typu diamentu. b. Błędy ułożenia w strukturze typu diamentu, wg [4] rzut na płaszczyznę typu $\{110\}$

Przez analogię do sieci regularnej ściennie centrowanej Hornstra stwierdził istnienie dwóch typów błędów ułożenia w sieci typu diamentu:

– **typ I**, tzw. *wewnętrzny (pojedynczy) błąd ułożenia* (ang. *intrinsic stacking fault*), związany z usunięciem najgęściej upakowanej płaszczyzny atomowej [19]. W przypadku sieci typu diamentu mowa jest o parze płaszczyzn. Na rys. 21b usunięto parę płaszczyzn c_1, c_2 , otrzymując kolejność płaszczyzn $a_1, a_2, b_1, b_2, a_1, a_2, b_1, b_2, c_1, c_2, a_1, a_2, \dots$

– **typ II**, tzw. *zewnętrzny (podwójny) błąd ułożenia* (ang. *extrinsic stacking fault*) utworzony w wyniku wprowadzenia ekstrapłaszczyzny o największym upakowaniu [19]. W przypadku sieci typu diamentu mowa jest o parze płaszczyzn. Na rys. 21b wprowadzono parę płaszczyzn c_1, c_2 otrzymując kolejność płaszczyzn $a_1, a_2, c_1, c_2, b_1, b_2, c_1, c_2, a_1, a_2, b_1, b_2, \dots$

Należy zauważyć, że to usunięcie lub wprowadzenie pary płaszczyzn atomowych zmienia kierunek wiązań atomowych pomiędzy kolejnymi płaszczyznami, zbliżając je do siebie. Prowadzi to do utworzenia płaszczyzn bliźniaczych [4], zaznaczonych na rys. 21b linią przerywaną.

Definiując *lamellę bliźniaczą* jako dwie równoległe płaszczyzny bliźniacze oddalone od siebie o kilka parametrów sieci krystalicznej, przedstawione błędy ułożenia można wyobrazić sobie jako wprowadzenie lamelli bliźniaczych różnicy grubości.

W następnej części (p. 2.4) zostaną ukazane przykłady lamelli bliźniaczych obserwowane na trawionej powierzchni krzemu.

Należy zaznaczyć, że błędy ułożenia są defektami, do utworzenia których nie jest potrzebna duża ilość energii.

Z geometrycznego punktu widzenia błąd ułożenia jest defektem dwuwymiarowym. Musi więc być ograniczony przez jednowymiarowy defekt struktury, jakim jest dyslokacja częściowa. Dyslokacje częściowe występujące w sieci typu diamentu, opisał Hornstra odnosząc je do wewnętrznych błędów ułożenia, gdyż ich występowanie w przypadku zewnętrznego błędu ułożenia jest nieprawdopodobne [4].

Hornstra przedstawił modele dyslokacji częściowej Schockleya i Franka występujące w sieci typu diamentu, i wykazał ich związek z istnieniem wewnętrznego błędu ułożenia [4].

LITERATURA

1. Jakubicki W., Bukowski A., Prus L.: Badania technologii struktury i własności monokryształów i kompozytów do celów elektronicznych. *Sprawozdanie z pracy 717/WAT/76*, etap I, t. 1, rozdz. 1 i 2
2. Jakubicki W.: Badania technologii, struktury i własności monokryształów i kompozytów do celów elektronicznych. *Sprawozdanie z pracy 717/WAT/76*, etap II, rozdz. 1
3. Jakubicki W., Bukowski A., Prus L.: *Materiały Elektroniczne 2 (18)*, 1977, 7
4. Hornstra J.: *J. Phys. Chem. Sol.* 5, 1958, 125
5. Bueren H.G. van: *Imperfections in crystals*. Amsterdam, North-Holland Publishing Comp. 1960
6. Szarras S.: *Budowa ciała stałego*. Warszawa, WNT 1974
7. Penkala T.: *Zarys krystalografii*. Warszawa PWN 1976
8. Rhodes R.G.: *Imperfections and active centres in semiconductors*. Oxford, Pergamon Press 1964
9. Read W.T. Jr.: *Phil. Mag.* 7, 45, 367, 1954 775
10. Vogel F.J. Jr.: *Acta Met.* 3, 1955, 245
11. Matere H.F.: *Defects electronics in semiconductor*. New York, Wiley Int. 1971 (tłum. ros. Moskwa, Izd. „Mir” 1974)
12. Billig E.: *J. Inst. Met.* 83, 1954-1955, 53
13. Kohn J.A.: *Amer. Mineralogist* 41, 1956 778
14. Kohn J.A.: *Amer. Mineralogist* 43, 1958 263
15. Hornstra J.: *Physica* 25, 1959, 409
16. Queisser H.J.: *J. Electrochem. Soc.* 110, 1, 1963, 53
17. Salkowitz E.J., Batchelder F.W von: *J. Metals* 4, 1952, 165
18. Frank F.C., Nicholas J.F.: *Phil. Mag.* 7, 44, 358, 1953, 1213
19. Tyrkiel E.F.: *Słownik terminologii metaloznawstwa*. Warszawa, WNT 1977