

刃位错可以作为晶体生长的台阶源吗？

刘光照

(中国科学院上海硅酸盐研究所)

在回答刃位错是否可以作为晶体生长的台阶源的问题之前，有必要简单回顾一下关于晶体生长机制的某些论点。

晶体(确切地说是晶面)要生长，要求在晶面上存在有生长台阶。对于粗糙面(按照晶体生长的现代理论^[4-9]，此时该晶面的粗糙化相变温度 T_r 低于晶体生长温度 T)，这是不成问题的，因为它上面有着大量可供生长单元结合在其上的生长坐位(扭折位置，或称半晶体位置)。而在平坦面(或称奇异面，对于这类晶面 $T_r > T$)上则缺少这样的生长位置。因而一般需要靠二维成核或螺位错的露头点来提供晶体生长的台阶。所以，二维核和螺位错可以充当晶体生长的台阶源。

最早提出二维核概念的是 Volmer，他的工作后来被 Kossel, Stranski 和 Kaischew 发展成为著名的分子动力学理论^[10]。当在晶面上形成一个二维核时，它的周边即成为生长单元赖以结合的台阶。不过，按照该理论，一般只有当系统的过饱和度高达 25—50% 时，晶体才可能借助二维核的形成而获得可观测的生长速度。而实际晶体却可以在低得多的过饱和度下生长。

上述理论和实际之间的矛盾由于 Frank 提出了晶体生长的螺位错机制而获得解决^[11]。按照 Frank 的观点，终止在晶体表面的螺位错形成了永不消失的生长台阶。Frank 最先考虑的是与生长界面垂直的螺位错，后来推广到所有包含有垂直于生长界面的 Burgers 矢量的分量的位错。换句话说，如果一个位错的 Burgers 矢量含有垂直于晶面的(螺型)分量时，这个位错即可以作为晶体生长的台阶源。这一推广的模型经过较严格的数学处理后便形成了著名的 BCF (Burton-Cabrera-Frank) 理论^[1]。这是晶体生长

理论发展史上的一次重大突破。后来，这一理论又由许多作者作了进一步的推广^[12-16]。

如果一个终止在生长表面的位错的 Burgers 矢量并不包含垂直于生长界面的分量时，是不是也可以作为晶体生长的台阶源，新近的发展给出了肯定的回答。任何一个位错，不论它的类型和特点如何，只要它终止在生长表面上，都可以作为晶体生长的台阶源。这在实验上已经证实，理论上也给出了一定的解释。

一、刃位错作为台阶源的实验根据

Bauser 首先在液相外延的 GaAs 密排面上观测到生长台阶。她的这个实验成为刃位错可以作为晶体生长台阶源的主要根据之一。

Bauser 和 Hagen^[17]仔细考察了 GaAs 的液相外延层。这些外延层是在低过饱和度下生长的。位错密度小，因此很适合于观测研究。他们首先用微分干涉显微术观测了取向为 (001) 的表面，主要观察形成生长小面的区域。虽然该生长表面一般来说在微观上是平坦的，可是仔细检查表明，在原子级水平上它们却不是平坦的，而且包含许多小的四角锥。然后他们又在标准双晶体衍射仪上对同一表面拍摄了 X 射线双晶体形貌图。从形貌图可以看出，在位错露头处有显著的衬度。把两张图进行对照后发现，在四角锥的顶点和位错露头点之间存在着严格的一一对应的关系。四角锥的顶点就是周期性生长台阶图样的中心。对其它液相外延层上有自然结晶面显露的区域仔细研究后，得到同样的结果。因此，他们认为所有实验都支持这样的观点：任何终止在晶体表面的位错，不论它的类型和特点如何，都可以作为台阶源，所不

同的只是它们作为台阶源的活性不同而已。

Bauser 和 Strunk^[18] 又用透射电镜检查了 GaAs 外延层, 并着重研究了其中的三个四角锥, 发现每个生长锥都联系着一个位错。他们进而借衬度实验确定了其中一个位错的 Burgers 矢量。结果表明, 这个位错并不包含垂直于生长表面的(螺型)分量。这就非常有力地证明了他们的上述观点。至此, 刃位错可以作为晶体生长的台阶源应该说是证据确凿。

不过, 值得注意的是 Frank 已指出^[19], 早在 1974 年在日本举行的第二届国际晶体生长春季讲习班上, Keller 便给出了在 NaCl 晶体上刃位错可以作为台阶源的很好的证明。只是由于 Keller 所在的东德 Bethge 小组希望进一步研究这个问题, 因而没有公开发表。实际上, 事情似乎还可以追溯到六十年代。那时 Bethge 小组就已经发现^[20], 当把 NaCl 晶体蒸发时, 在晶体表面上发现的同心台阶结构是在刃位错处成核的。这实际上也就孕育了刃位错可以作为晶体生长台阶源的内容。

在 1983 年第七届国际晶体生长会议上, Strunk 和 Bauser^[21] 又对此作了进一步研究, 与此同时, Keller^[22] 也重新注意到这个问题。

二、理论解释

一个终止在晶体表面的螺位错, 在它的露头处必定存在着一个几何上的高度差, 这就是台阶。因此, 螺位错作为台阶源是很容易理解的。然而刃位错显然不可能有这样的高度差。那么, 刃位错为什么也可以作为台阶源? 它作为台阶源与螺位错的情况有何不同?

目前, 关于刃位错作为台阶源的活性来源问题已有多种说法。有的认为这种活性可能由于库仑相互作用, 有的认为由于弹性弛豫, 也有的认为由于杂质在位错处的偏析。值得注意的是, Bauser 等人^[18] 以及 Frank^[19] 给出的解释。

Bauser 和 Strunk 将其 Burgers 矢量虽不包含垂直于生长晶面的分量但又可以作为台阶源的位错叫作横向台阶源 (transverse step sou-

rce)。他们认为, 横向台阶源的活性可能来源于它分解成两个不全位错。根据他们的观点, 这一分解将显著改变在位错露头点处的表面再构的情况。由此引起的对电荷分布的扰动会大大提高对新分子的捕获几率。另一方面, 分解后的两个不全位错有可能包含着垂直于生长表面的 Burgers 矢量的分量, 这自然会在表面形成一个台阶。

Frank^[19] 认为刃位错作为台阶源的活性是由于晶体总含有表面应力。晶体表面应力的大小与表面自由能相当, 但性质不同。表面自由能是一个标量, 是拉伸的; 而表面应力是张量, 既可以是拉伸的, 也可以是压缩的。例如, NaCl 晶体的表面应力是拉伸的。表面应力将影响表面核的能量。以 NaCl 为例, 由于它的表面应力是拉伸的, 因而表面层中离子间的距离要比体内离子间的正常距离大。当为了使晶体长大而形成表面核时, 表面核需要受到拉伸才能与三维晶体提供的衬底相适应。因此, 如果衬底晶体受到压缩, 表面核的能量可以减小。反之, 对表面应力为压缩性的晶体, 将衬底晶体拉伸则可以减小表面核的能量。我们知道, 如果一个刃位错终止在晶体表面上, 它便在该表面上提供了这样一个区域。在这个区域内, 位于位错露头点的一侧是受拉伸的, 而另一侧则受到压缩。因此, 无论表面应力是拉伸的还是压缩的, 在刃位错露头点附近总有一块地方, 在这里成核要比在表面其他不处于应变状态的地方成核要有利些。Frank 认为这一来源与 Bauser 等人提出的相比, 其意义要广泛些。

由此我们看出, 刃位错作为台阶源, 并不象螺位错那样在表面上提供一个几何台阶, 而是提供一个在能量上有利于表面成核的区域。台阶实际上仍然是靠二维成核形成的。因此所形成的台阶一般应为封闭的同心环。这是一种择优发生在刃位错露头点处的二维成核, 所需要的能量比常规二维成核小。

螺位错与刃位错的区别在于它们的 Burgers 矢量是平行于还是垂直于位错线; 而对于晶体生长来说, 重要的则是它们的 Burgers 矢量是垂

直于还是平行于生长表面,两者一般并不一致。这两种位错都可以作为晶体生长的台阶源。因此,就其促进晶体生长的作用来说,似乎不宜再区分螺位错和刃位错。所以, Bauser 和 Strunk 首先建议^[8], 如果一个位错的 Burgers 矢量包含垂直于生长表面的分量,则称为纵向台阶源 (longitudinal step source); 如果不包含垂直于生长表面的分量,则称为横向台阶源。Frank^[19] 肯定了他们的作法,但认为这两个名称的意义欠明确。他建议用直立的 (rampant) 的和平卧的 (couchant) 的台阶源,并提请人们讨论。

目前,关于刃位错作为晶体生长台阶源的研究还在深入当中,我们应注意这一进展。

参 考 文 献

[1] W. K. Burton, N. Cabrera, and F. C. Frank, *Phil Trans. Roy. Soc.*, **A243** (1951), 299.
 [2] K. A. Jackson, *Liquid Metal and Solification*, ASM Clereland, (1958).
 [3] D. E. Temkin, in *Crystallization Processes*, Consultants Bureau, New York, 1966, 15.
 [4] H. J. Leamy and G. H. Gilmer, *J. Crystal Growth* **24/25** (1974), 499.
 [5] J. P. van der Eerden, P. Bennema, and T. A. Cherepanova, *Prog. Crystal Growth Characterization*, **1**(1978), 219.

[6] H. van Beyeren, *Phys. Rev. Letters*, **38**(1977), 933.
 [7] H. J. F. Knops, *Phys. Rev. Letters*, **39**(1977), 766.
 [8] R. H. Swendsen, *Phys. Rev. B*, **17**(1978), 3710.
 [9] Nai-Ben Ming (闵乃本) and F. Rosenberger, In *The Program and Abstracts of ICCG-7* (1983), SY 2/6.
 [10] R. Kaischew, *J. Crystal Growth*, **51**(1981), 643.
 [11] F. C. Frank, *Disc. Faraday Society*, **5**(1949), 48.
 [12] A. A. Chernov, *Sov. Phys. Usp.*, **4**(1961), 116.
 [13] G. H. Gilmer, R. Ghez and N. Cabrera, *J. Crystal Growth*, **8**(1971), 79.
 [14] N. Cabrera and H. M. Levine, *Phil. Mag.*, **1** (1956), 450.
 [15] P. Bennema and G. H. Gilmer, in *Crystal Growth, An Introduction*, ed. P. Hartman, North-Holland, Amsterdam, (1973), 263.
 [16] J. P. van der Eerden, *J. Crystal Growth* **56** (1982), 174
 [17] E. Bauser and W. Hagen, *J. Crystal Growth*, **50** (1980), 771.
 [18] E. Bauser and H. Strunk, *J. Crystal Growth*, **51** (1981), 362.
 [19] F. C. Frank, *J. Crystal Growth*, **51**(1981), 367.
 [20] H. Bethge, *Phys. Status Solidi*, **2**(1962), 3775.
 [21] H. Strunk and E. Bauser, *J. Crystal Growth*, **65** (1983), 587.
 [22] K. W. Keller, in *The Program and Abstracts of ICCG-7* (1983). SY 1/09.

(上接封三)

光速测量的发展.....	7 (435)
探索«铁磁研究»的门径.....	9 (568)
尼耳斯·玻尔的功绩与他的爱国主义——纪念尼耳斯·玻尔诞生一百周年.....	11 (641)
有关尼耳斯·玻尔的文献概况.....	11 (644)
三位著名的华裔物理学家.....	11 (700)
卡诺定理的发现以及它的研究方法.....	12 (753)
中国古代光学的格术.....	12 (756)
库仑对电学和磁学的贡献——纪念库仑定律发现两百周年.....	12 (759)

其 它

微离子束技术及其在微细加工中的应用.....	1 (24)
贝壳珍珠层结构的测定.....	1 (29)
在实验室中获得高密态物质.....	5 (308)
六面体型高压容器内的压力分布.....	6 (374)
朗缪尔-布洛奇特薄膜及其应用.....	7 (399)
关于工业部门与高等院校协作研究的若干问题.....	8 (473)
冶金工业的技术改造需要物理人才.....	8 (479)
固体中可能存在的两种新效应.....	8 (508)
孤立带电导体的面电荷密度和曲率的关系.....	9 (574)
谈谈球状闪电.....	11 (661)
环境物理污染现状及其控制对策.....	12 (729)