

**ŠIAULIŲ UNIVERSITETO
GAMTOS MOKSLŲ FAKULTETO
FIZIKOS KATEDRA**

AKVILĖ URBONAVIČIŪTĖ

**TAŠKINIŲ DEFEKTŲ, SUSIJUSIŲ SU PRIEMAIŠINIU
DEGUONIMI, TYRIMAS SILICIO MONOKRISTALE,
PANAUDOJANT FURJE TRANSFORMACIJOS
INFRARAUDONŲJŲ SPINDULIŲ SPEKTROSKOPIJĄ**

Magistro studijų programos “Fizika”

MAGISTRO DARBAS

Vadovas
dr. Žilvinas Norgėla

Šiauliai, 2011

Anotacija

Magistro darbą sudaro įvadas, 4 skyriai, 10 poskyrių, išvados, 42 literatūros šaltiniai, priedai. Darbe pateikta 40 paveikslų. Darbo apimtis – 54 puslapiai. Pridedama kompaktinė plokštelė.

Magistro darbe nagrinėjami taškiniai defektai, susiję su deguonimi, panaudojant Furje transformacijos infraraudonųjų spindulių (FT-IR) spektroskopiją. Pirmame skyriuje aprašomi defektai kristaluose, jų klasifikacija bei defektų kompleksų įvairovė. Antrame skyriuje aptartos taškinių defektų reakcijos. Trečiame skyriuje aprašytas FT-IR metodas, aptariamos optinės silicio savybės. Ketvirtame skyriuje pateikta šlifuočių ir nešlifuočių silicio plokštelių absorbcijų spektrų analizė. Taip pat įvertinti silicio monokristale taškinių defektų absorbcijos koeficientai prieš švitinimą Rentgeno spinduliais ir po jo. Bandyta juos susieti su vykstančiomis defektų reakcijomis. Prieduose pateikiami skaičiavimai, atlikti naudojant MathCad programą.

Annotation

The Master's thesis consists of an introduction, 4 chapters, 10 subchapters, conclusions, 42 references of literature and the annexes. There are 40 pictures in this work. The volume of the work is 54 pages without the annexes. There is attached a compact disc.

The point defects related with oxygen impurities are being analyzed using Fourier transform infrared spectroscopy (FT-IR). The first chapter is up for the defects in crystals, their classification and the variety of defects complexes. In the second chapter there are discussed the reactions of point defects. The third chapter is analyzing FT-IR method, discussing the optical properties of silicon. The fourth chapter presents the IR absorption spectrum of polished and unpolished silicon wafers. There are also estimated the coefficients of absorption in monocrystal before using X-ray and after it, trying to relate them with some kind of reactions between impurities.

The annexes contain MathCad calculations.

Turinys

IVADAS	4
1. DEFEKTAI KRISTALUOSE	6
1.1. TAŠKINIAI DEFEKTAI.....	6
1.2. RADIACINIAI DEFEKTAI IR JŲ KOMPLEKSŲ ĮVAIROVĖ.....	8
1.2.1 Vakansija.....	9
1.2.2. Vakansija – deguonies atomas (<i>A</i> – centras).....	10
1.2.3 Vakansija – du, trys ir daugiau deguonies atomų.....	11
1.2.4. Vakansija – donorinės priemaišos atomas (<i>E</i> – centras).....	11
1.2.5. Vakansija ir III grupės elementų priemaišos.....	12
1.2.6. Vakansija – priemaiša, kompleksas.....	12
1.2.7. Divakansija.....	13
1.2.8. Daugiavakansiniai kompleksai.....	14
1.2.9. Daugiavakansiniai kompleksai su deguonimi.....	15
1.2.10. Si – O _i kompleksas apšvitintame Cz – Si kristale.....	15
1.3. RADIACIJOS POVEIKIS TAŠKINIAMS DEFEKTAMS.....	15
2. TAŠKINIŲ DEFEKTŲ REAKCIJOS	18
2.1. ANGLIES IR DEGUONIES DEFEKTŲ REAKCIJOS.....	18
2.2. VO KOMPLEKSŲ REAKCIJOS.....	25
3. FURJE TRANSFORMACIJOS INFRARAUDONŲJŲ SPINDULIŲ SPEKTROSKOPIJA (FT – IR METODAS)	35
3.1. KIEKYBINĖ ANALIZĖ.....	36
3.1.1. Optinės silicio savybės. Atspindžio koeficientas.....	37
3.1.2. Absorbcijos koeficientas.....	38
3.2. OPTINIO TANKIO NUSTATYMO BŪDAI.....	40
4. TAŠKINIŲ DEFEKTŲ, SUSIJUSIŲ SU DEGUONIMI, TYRIMAS SI MONOKRISTALE, PANAUDOJANT FT-IR SPEKTROSKOPIJĄ	42
4.1 NEŠLIFUOTOS SI PLOKŠTELĖS TYRIMO REZULTATAI.....	42
4.1.1 Nešlifotos, nešvitintos Si plokštelės tyrimas.....	42
4.1.2 Nešlifotos, švitintos Si plokštelės tyrimas.....	43
4.1.3 Nešlifotų Si plokštelių tyrimo rezultatų palyginimas.....	44
4.2. ŠLIFUOTŲ SI PLOKŠTELIŲ TYRIMO REZULTATAI.....	46
4.2.1 Šlifotos, nešvitintos Si plokštelės tyrimas.....	46
4.2.2 Šlifotos, švitintos Si plokštelės tyrimas.....	47
4.2.3 Šlifotų mėginių tyrimo rezultatų palyginimas.....	48
4.3. DEFEKTŲ REAKCIJOS.....	50
IŠVADOS	51
LITERATŪROS SĄRAŠAS	52
PRIEDAI	55

Įvadas

Šių dienų pasaulyje kasdien naudojami įvairūs elektriniai/elektroniniai prietaisai: televizoriai, kompiuteriai, mobilieji telefonai ir t.t. Dauguma šių prietaisų yra gaminami iš puslaidininkių ne vien dėl jų ypatingų savybių, bet dar todėl, kad jie patvarūs, patikimi, ekonomiškai. Kasdien visi šie įrenginiai tobulėja dėl to, kad yra sparčiai vystoma puslaidininkių technologijų sritis.

Viena iš puslaidininkio gamybos medžiagų yra silicis. Jis gaminamas elektrinėse krosnyse, redukuojant smėlį ar kvarcą. Nuo silicio pagaminimo būdo labai priklauso puslaidininkio kokybė.

Ne paslaptis, kad defektai turi įtakos puslaidininkinių prietaisų greitaveikai. JAV mokslininkai netgi pateikė įdomų pasiūlymą – į mobiliuosius telefonus bei kitą nešiojamą elektroniką įmontuoti miniatiūrinius radiacijos matuoklius. Matuokliai būtų gaminami puslaidininkių elektronikos pagrindu, ir jie galėtų aptikti radiacijos šaltinius iš maždaug 5 metrų atstumo. Informacija apie radinius būtų siunčiama saugumo tarnyboms. Tai išties protinga ir jau veikianti sistema. Technologija jau testuota universiteto teritorijoje naudojant labai silpną radiacijos šaltinį, ir įrodyta, jog siūloma sistema yra pakankamai veiksminga.

Radiaciniai defektai silicyje yra sukuriama mėginį švitinant elektronais, neutronais bei gama spinduliuote. Tokiu būdu atsiranda taškinių defektų kristale – vakansijų, priemaišnių atomų gardelės mazguose, tarpmazginių atomų, defektų kompleksų ir pan. Dėl to yra sutrikdoma kristalo struktūra, draustinėje kristalo juostoje gali atsirasti papildomų lygmenų. Pakitimai gali smarkiai paveikti kristalo fizines savybes.

Pakitusių energetinių lygmenų tyrimas gali būti atliekamas keliais metodais: EPR (Electronic Paramagnetic Resonance), DLTS (Deep Level Transient Spectroscopy), infraraudonųjų (IR) spindulių spektroskopijos ir LVM (Localized Vibration Mode) metodais.

Šiame darbe bus aptarti radiacinių defektų generavimo mechanizmai, defektų kompleksų formavimasis. Taip pat bus pateikti eksperimentiškai išnagrinėtų su deguonimi susijusių taškinių defektų absorbcijų koeficientų pokyčiai, atsižvelgiant į silicio oksido (SiO_2) sluoksnio pašalinimą.

Tyrimo hipotezė: deguonies atomai iš silicio oksido sluoksnio skverbiasi gilyn į monokristalo vidų.

Tyrimo tikslas: ištirti taškinius defektus, susijusius su priemaišiniu deguonimi, panaudojant Furje transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopiją (FT-IR).

Tyrimo objektas: taškiniai defektai silicio monokristale, susiję su priemaišiniu deguonimi.

Darbo uždaviniai:

- Išanalizuoti mokslinę literatūrą, skirtą radiacinių defektų tyrimo metodams.
- Susipažinti su radiacinių defektų kūrimo mechanizmais.
- Apskaičiuoti taškinių defektų, susijusių su deguonimi, absorbcijos koeficientus.

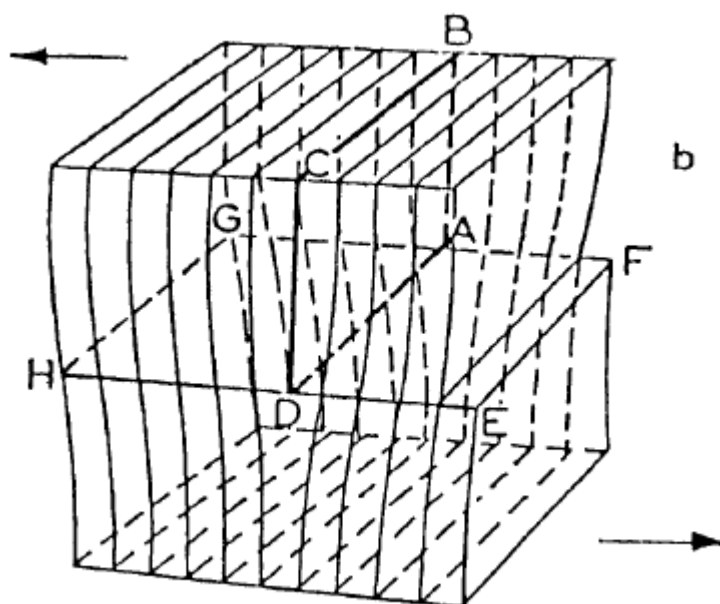
Tyrimo metodai:

- Mokslinės literatūros analizė.
- Eksperimentinė taškinių defektų identifikacija n-tipo silicio monokristaluose.

1. Defektai kristaluose

Defektai (bet kokie nukrypimai nuo idealios struktūros) kristaluose gali būti sukurti įvairiais būdais: šildant – šaldant, deformuojant ar švitinant tam tikromis dalelėmis [1]. Jie būna laikinieji ir pastovūs. Pirmieji atsiranda, kuomet kristalas paveikiamas mechaniškai, šiluminiais ar elektromagnetiniais spinduliais. Pastovūs defektai yra skirstomi į kelias grupes:

- Taškiniai (energetiniai, elektroniniai, atominiai).
- Vienmačiai (linijiniai – ribinės ir sraigtinės dislokacijos) (1 pav.). Tai linijiniai defektai, kurie nusidriekia per visą kristalo sluoksnį [2].



1 pav. Kraštinė dislokacija, pažymėta AD, plokštumoje EFHG [2]

- Dvimačiai (plokštuminiai – kristalitų ribos).
- Tūriniai/trimačiai (įtrūkimai, intarpai ir pan.) [3].

1.1. Taškiniai defektai

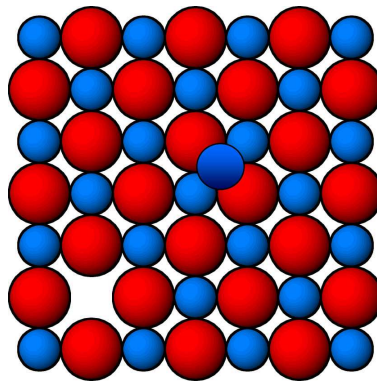
Tai dėl kristalinės gardelės šiluminių svyravimų, kurie egzistuoja kristaluose esant bet kokioms temperatūroms, atsirandantys defektai (Frenkelio ir Šotki defektai).

Taškiniai energetiniai defektai dažniau susidaro esant aukštomis temperatūroms. Kristalinės gardelės atomai svyruoja apie pusiausvyros padėtį ir nukrypsta tai į vieną, tai į kitą pusę. Taip yra pažeidžiama transliacinė simetrija. Dar gali būti stebima kita taškinių defektų rūšis, jeigu Rentgeno, γ spinduliais ar α dalelėmis yra sužadunami kai kurie kristalinės gardelės atomai.

Taškiniai elektroniniai defektai susidaro tada, kai atskiri gardelės atomai yra pakeičiami kitokio valentingumo atomais. Jie dar vadinami donorinėmis ar akceptorinėmis priemaišomis. Jie keičia laisvųjų krūvininkų koncentraciją.

Taškiniai atominiai defektai susidaro, kai nekeičiant elektronų koncentracijos, pažeidžiama erdvinės gardelės struktūra. Tokio tipo defektai gali būti kelių rūšių: pakeitimo/įterpimo ar vakansijos. Pirmuoju atveju mazge esantis atomas yra pakeičiamas kitu tokio paties valentingumo atomu. Toks defektas yra ryškus, jeigu naujasis atomas labai skiriasi savo matmenimis nuo senojo atomo. Tokiu atveju yra deformuojama pati gardelė, o tarpatominės plokštumos išsigaubia/įsigaubia. Įterpimo atveju tarpmazgyje atsiranda to paties kristalo ar svetimas atomas.

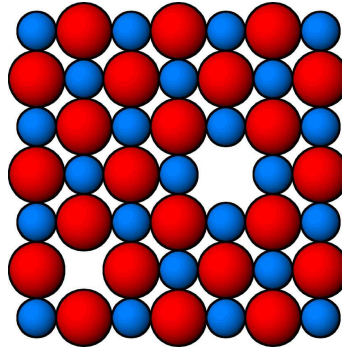
Taškiniai kristalų defektai atsiranda ir esant aukštomis temperatūroms. Šiluminių virpesių energija pasiskirsto netolygiai. Atsiranda atomų, kurie įgyja tiek energijos, kad jos užtenka suardyti ryšius su šalia esančiais atomais. Tokiu atveju atomai gali palikti savo mazgus ir pereiti į tarpmazgį. Taip atsiranda iš karto du defektai: vakansija – tuščias kristalinės gardelės mazgas ir atomas, dislokuotas tarp mazgų. Tai – Frenkelio defektas (2 pav.).



2 pav. Frenkelio defektas [4]

Jam susidaryti reikia maždaug 14 – 35 eV energijos [5]. Vakansijos turi savo žymėjimo simbolį V. Jos gali turėti krūvį – katijoninės (V^+), anijoninės (V^-). Kristale esant vakansijoms, kristalinė gardelė deformuojasi.

Dalis atomų pereina į kristalo paviršių, susidaro naujas atomų sluoksnis. Likusios vakansijos kristale yra vadinamos Šotki defektais (3 pav.). Vakansijų koncentracija sparčiai auga kylant temperatūrai [1].



3 pav. Šotki defektas [4]

Galimi ir radiaciniai taškiniai defektai, kurie atsiranda apspinduliuojant kristalą didelės energijos srautu. Po švitinimo šie defektai rekombinuoja, todėl gali būti vadinami nepastoviais defektais.

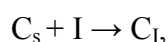
Yra žinomi tokio tipo defektų sužadinimo būdai:

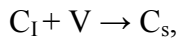
- 1 *Smūginis mechanizmas* (tiesioginis greitos dalelės ir kristalo gardelės atomo susidūrimas). Būdingas tik tokioms dalelėms, kurios gali turėti didelį judesio kiekį.
- 2 *Elektroninės kristalo sistemos sužadinimas*. Elektromagnetinės spinduliuotės kvantai perduoda dalį savo energijos kristalinės gardelės atomo elektronams branduolinio fotoefekto momentu ir taip sukelia radiacinių defektų atsiradimą.

Radiaciniai defektai kristaluose yra labai skirtingi. Jie skirstomi į du tipus: pirminiai (susiformuoja iš karto, vos tik ryšiai nutraukiami). Jais gali būti tarpmazginiai atomai, vakansijos. Antriniai – susiformuoja per tam tikrą laiką, kol taškiniai defektai migruoja ir susijungia tarpusavyje su priemaišomis ar pan.

1.2. Radiaciniai defektai ir jų kompleksų įvairovė

Kaip jau minėta, paprasčiausi defektai – vakansija ir tarpmazgis (Frenkelio pora). Kad susidarytų toks defektas, vyksta tokios reakcijos:





kur C_I , C_s yra priemaišų tankiai mazguose ar tarpmazgiuose, V – vakansijų tankis, I – tarpmazginių atomų tankis.

Atliekant eksperimentus buvo nustatyta, kad kietųjų kūnų sublimacijos energija yra maždaug 5 eV. Taigi galima teigti, jog tūryje esančių atomų ryšio energija yra 10 – 100 eV. Kalbant apie fononus – jų energija yra gerokai mažesnė. Dalelės, turinčios didelę energiją, tamptai sąveikauja su kristale esančiais atomais gerokai trumpiau nei trunka kristalo virpesiai. Taigi kristalas nespėja relaksuoti. Energiją gardelei dar galima perduoti nesmūginiais procesais. Tokiu atveju galima tikėtis sukurti defektą su mažesne energija negu reikia smūginio proceso metu. Nustatyta, kad tokiems procesams labai tinka minkštieji Rentgeno spinduliai ir nedidelių energijų elektronai (10 – 100keV).

Anksčiau buvo manoma, kad Rentgeno spinduliai sukuria laisvuosius elektronus, kurie gali būti sugaudomi kitais procesais sukurtuose defektuose. Netrukus buvo išsiaiškinta, jog kambario temperatūroje tokiuose kristaluose beveik nėra laisvų anijoninių vakansijų, o tik katijoninių ir anijoninių vakansijų kompleksai. Taip pat buvo manoma, kad taškinių defektų atsiradimas kristale dėl apspinduliavimo labiausiai yra susijęs su smūginio atomų išmušimu iš gardelės mazgų. Kuriame paviršiniai defektai gali migruoti gilyn į kristalą. Taip vykdoma netermiškai stimuliuojama difuzija.

Su kiekvienu atsiradusiu defektu silicio (Si) kristalas sąveikauja skirtingai, o augant temperatūrai – peršokama prie defektų, kuriančių stabilesnius ryšius. Ilgą laiką tarpą buvo galvojama, kad migracijos aktyvacijos energijos vertės yra daug didesnės, tačiau vėliau buvo suprasta, kad patys defektai dažnai gali būti pagauti kitų defektinių centrų [6].

1.2.1 Vakansija

Jeigu ji yra izoliuotas defektas, tokiu atveju silicio kristale ji gali egzistuoti tik esant labai žemoms temperatūroms. Vakansija (V) ir tarpmazginis silicio atomas (I), sukurti kristale po apspinduliavimo, veikia kaip varikliai įvairiose difuzijos reakcijose ir reaguoja su priemaišomis, formuojantis naujiems kompleksams [7]. Jie gali egzistuoti skirtingai įkrautose būsenose. Abu gali būti neutralūs (V^0, I^0), teigiami (V^+, I^+), dvigubai teigiami (V^{2+}, I^{2+}), neigiami (V^-, I^-) ir pan. [8]. p – tipo silicyje vakansijų būsenos yra panašios – neutralios ir neparagnetinės. Kai yra V^+ , rezonansinis signalas atsiranda, kai $h\nu < 0,35$ eV, tokiu būdu vakansija yra išvedama iš būsenos V^0 . taip įvyksta todėl, kad vienas iš elektronų, kuris atitinka vakansiją supančių atomų ryšius, pereina į valentinę zoną. Kai yra V^- , rezonansinis signalas atsiranda, kai $h\nu > 1$ eV. Taip vakansija yra

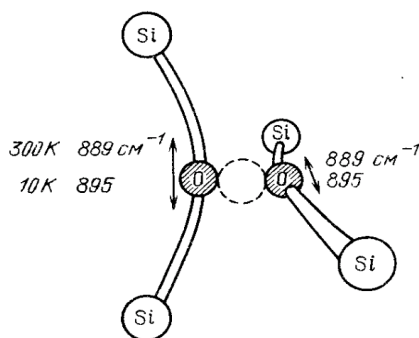
išvedama iš V^0 . Darant atkaitinimą (150 – 180 K), vakansijos ima nykti. Jų išnykimo greičiui pakankamai didelę įtaką turi deguonies koncentracija kristale. p – tipo silicio kristale tarp būsenų V^{2+} ir V^0 egzistuoja dvielektroninis perėjimas, o V^{2+} būseną yra stabili. Silicio kristalo bandiniai, kurie turi mažą deguonies koncentraciją ($\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), yra papildomai legiruojami atomais ($\sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). Jie ir tampa vakansijų pagavos centrais [9]. n – tipo silicio vakansijų migraciją ir sąveiką su priemaišomis nusako koncentracijos padidėjimas antriniuose defektuose.

Vakansijos defektas turi didesnę neterminės rekombinacijos tikimybę. Tarpmazginis O_i įlenda į V ir stipriai susiriša su artimiausiais kaimynais. Likę du nesusijungę ryšiai suformuoja akceptorinį lygmenį $E_C = 0,17 \text{ eV}$. Kitų grupių pagauti elementai kuria pavienius akceptorinius lygmenis: P ($E=0,43 \text{ eV}$), As ($E=0,47 \text{ eV}$), Sb ($E=0,44 \text{ eV}$). Jungiantis vakansijoms, įmanoma sukurti keturias būsenas draustinėje juostoje. Priklauso ir nuo to, kiek elektronų jos yra pagavusios – $(VV)^+$, $(VV)^0$, $(VV)^-$, $(VV)^{2-}$. Vakansijos, pagavusios vandenilio atomus, yra nesunkiai išskiriamos EPR (elektronų paramagnetinis rezonansas) metodu dėl ryškiai išsiskiriančių kompleksų VH, VH_2 , VH_3 , VH_4 vibracinių modų. Visi kompleksai, išskyrus paskutinįjį, turi nutrauktus ryšius, todėl manoma, kad jie yra elektriškai efektyvūs. Tikimasi, kad dėl ryšių panašumo VO turi elgtis kaip ir VH_2 .

Tarpmazginių atomų migracija silicio kristale yra susijusi su defekto būsenos pakitimais. Tokie atomai gali užimti kelias būsenas: tetraedrinę (T), heksagonalinę (H). Buvo atlikti tarpmazginio atomo kristale elektrinės struktūros skaičiavimai [10], remiantis Grino funkcijos metodu. Iš gautų rezultatų matyti, kad labiau priimtina yra silicio T padėtis, nes šioje padėtyje jis neturi gilių lygmenų draustinėje juostoje. Migruodami tarpmazgių atomai abi padėtis ir eina link mažesnio elektronų tankio.

1.2.2. Vakansija – deguonies atomas (A – centras)

Tai yra dominuojantis defektas silicio kristaluose (4 pav.), turintis padidintą deguonies atomų koncentraciją ($10^{17} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). Jis formuojasi dėl terminio donoro poveikio, kai kristalas yra atkaitinamas $450 \text{ }^\circ\text{C}$ temperatūroje, po apspinduliavimo greitaisiais neutronais [11] arba dėl apšvitinimo MeV elektronais [12]. Maksimali koncentracija yra pasiekama esant didelėms švitinimo dozėms. Įprastai ji yra limituojama dėl difunduojančių Si tarpmazginių atomų. Vyksta reakcija $VO + I \rightarrow O_i$. Šią reakciją įmanoma pristabdyti naudojant anglies prisotintą Čochralskio būdu užaugintą kristalą (Cz-Si) [13]. Tokioje medžiagoje pagrindinis „gautytojas“ yra tarpmazginė anglis (I), tokiu būdu daug didesnė VO kompleksų koncentracija gali būti pasiekta. VO defekto išsami analizė gali būti atliekama naudojant EPR metodu gautus spektrus bei infraraudonosios spinduliuotės absorbciją apšvitintame elektronais Si kristale.



4 pav. A – centro modelis, Si – O – Si ryšio vakansijų svyravimų dažnis, esant 10 ir 300 K temperatūrai [11]

Pavienės vakansijos, kurios atsiranda apšvitinant kristalą, difunduoja kristale ir gali būti pagaunamos ištirpusio deguonies atomų. A – centras tampa antriniu defektu: vakansija + tarpmazginis deguonies atomas = VO_i . Vakansijoje persitvarko nutrūkę ryšiai – du iš keturių susijungia su deguonies atomais.

1.2.3 Vakansija – du, trys ir daugiau deguonies atomų

Tai yra centro modelis, kuris taip pat buvo išanalizuotas naudojantis EPR, apšvitinus elektronais. Neseniai buvo atrasta, kad po atkaitinimo pavyzdėliai, apšvitinti elektronais, turi pakitimą absorbcijos spektre ties 895 cm^{-1} [12]. Stiprus padidėjimas IR spektre, priskiriamas deguonies dimerui, buvo aptiktas anglies nuskurdintame Čochralskio būdu (Cz-Si) užaugintame mėginėlyje, kuris buvo švitinamas $300 - 400^{\circ}\text{C}$ temperatūroje. Tokie svarbūs atradimai gali būti labai lengvai paaiškinami tokia reakcija: $VO_2 + I \rightarrow O_{2i}$. Paaiškinimas randamas iš studijų apie anglimi prisotintą Si kristalą. Šioje medžiagoje vien tik mažas augimas O_{2i} linijose yra iškart aptinkamas. Yra gerai žinoma, kad Watkins`o mechanizmas ($I + C_s \rightarrow C_i$) yra dominuojanti reakcija anglimi turtingame kristale. šios reakcijos paplitimas nuslopina dimerų formavimąsi, bet stimuliuoja VO_2 augimą [12].

1.2.4. Vakansija – donorinės priemaišos atomas (E – centras)

Tokie kompleksai yra aptinkami Si kristaluose, legiruotuose fosforu [14]. Centrai ypatingi tuo, kad juos galima aptikti esant neutraliai sužadintai būsenai, kai Fermi lygmuo yra $E_c = 0,4\text{ eV}$. Spektro pasidalijimas yra susijęs su Si ir donorinių priemaišų atomų sąveika. E – centro modelis yra patvirtintas termiškai aktivizuoto elektrono perėjimu. Dėl tokių perėjimų praplatėja linijos, pats perėjimas būna stebimas tik esant aukštai temperatūrai.

Tai elektriškai aktyvūs defektai. Jie aktyviai reaguoja į pernešėjų procesus. Manoma, kad aktyvacijos energija priklauso nuo energijos kitimo. Tokie pokyčiai gali priklausyti ir nuo temperatūros.

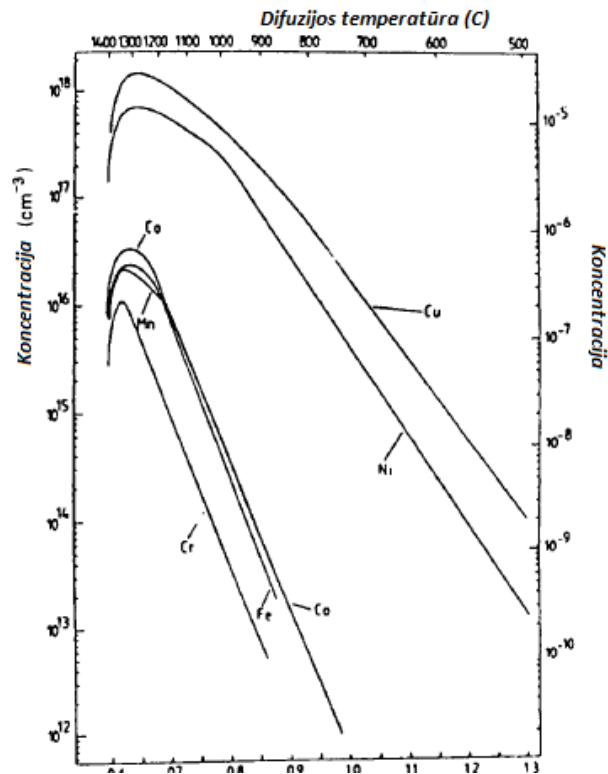
Silicyje pirmą kartą aprašytas 1964 m [15]. {P,V} pora dabar yra žinoma [16], kad gali egzistuoti trijose krūvių būsenose silicio kristale (su vieninteliu donoriniu lygmeniu $E_V + 0.27$ eV) ir pora {Sb,V} gali egzistuoti 4 būsenose Ge kristale. Tai buvo neįtikėtina, kadangi germanio tarpeliai yra daug mažesni negu silicio. Situacija tampa labiau komplikauta $Si_{1-x}Ge_x$ kristale. Eksperimentiškai [17], kai $x=0.75$, elektrono pagava viršutinėje juostos dalyje tampa skyliniais spąstais žemutinėje dalyje. Tolimesnė teorija [18] numato, kad E – centrų stabilumas nekinta tiesiškai su lydinio sudėtimi.

1.2.5. Vakansija ir III grupės elementų priemaišos

Trečios grupės elementų (B, Al) priemaišos tampa vakansijų pagavos centrais. Jie yra analogiški E – centrams p – tipo silicio kristaluose. Į kristalą papildomai įvedus F – Al_3 ar F – B_3 , sumažėja deguonies ar kitų centrų pagava. Įmanomos tokios poros: $Fe_i - B_s$, $Fe_i - Al_s$, $Fe_i - Ga_s$, $Fe_i - In_s$ ir kt. [3].

1.2.6. Vakansija – priemaiša, kompleksas

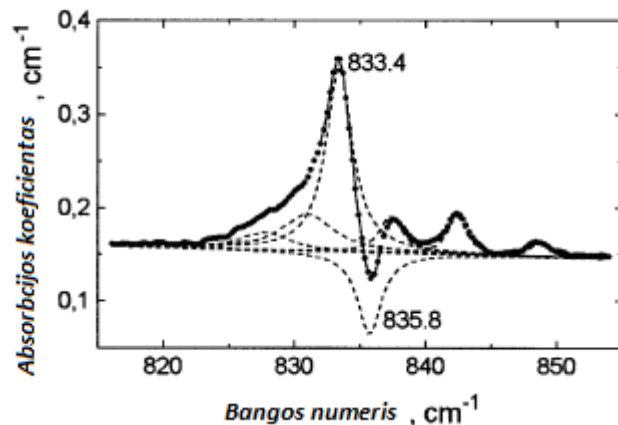
Kita svarbi priemaišų klasė – metalai. Tai – titanas, vanadis, chromas, manganas, geležis, kobaltas, nikelis ir varis (5 pav.). Jų atomai taip pat gali sudaryti kompleksus su vakansijomis [2]. Visos šios priemaišos yra greiti tarpmazginiai difundatoriai.



5 pav. Pereinančiųjų metalų grupės tirpumas silicio kristale [2]

1.2.7. Divakansija

Tai taip pat elektriškai aktyvus defektas, kuris išlieka stabilus kambario temperatūroje. Pagal šio defekto sudėtį galima spręsti apie kitų defektų koncentracijas. Divakansijos įvesties efektyvumas silicio kristale, apšvitintame elektronais ir banduolinėmis dalelėmis, padidėja didinant boro, anglies ar deguonies koncentraciją. Boro ir anglies atomai tokiu atveju tampa tarpmazginių atomų pagavos centrais. Legiruotų deguonies atomais defektų formavimosi procesas yra pakankamai sudėtingas. Jie gali tapti pagavos centrais, tarpmazginiais atomais (O_iSi_i , absorbcijos juosta 935 cm^{-1}) bei vakansijomis (A - centrais). Divakansijų (V_2) ir divakansijos – deguonies centro (V_2O) atkaitinimas vyksta $250 - 350\text{ }^\circ\text{C}$ temperatūroje. A – centrų dingimas esant $300 - 350\text{ }^\circ\text{C}$ temperatūroje visuomet yra lydimas 895 cm^{-1} smailės atsiradimo. Tai paaiškinama VO komplekso ir O_i susijungimu (6 pav.).

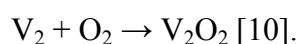
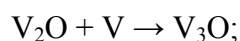
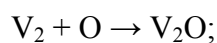


6 pav. Absorbacijų spektrų skirtumai esant 10 K temperatūrai ir atkatinant 300 °C temperatūroje 30 minučių. Taškuota linija parodo spektro skirtumus [12]

V₂O kompleksas buvo atrastas detaliam studijuojant elektroninio paramagnetinio rezonanso (EPR) duomenis, apšvitintų elektronais silicio kristalų. Nors šis kompleksas turi Si – O – Si junginio struktūrą (kaip ir VO), buvo atrasta, kad deguonies vibracinė juosta (šiam kompleksui) yra labai panaši į VO ir nėra tvirtai apsprendžiama iš intensyvesnės 836 cm⁻¹ juostos [12]. Neseni skaičiavimai [19] taip pat įrodė, kad asimetriniai VO ir V₂O įtempimo virpėjimai yra beveik tokie patys.

1.2.8. Daugivakansiniai kompleksai

Silicio kristalus švitinant aukštos energijos dalelėmis, ima formuotis daugivakansiniai kompleksai. Jie susideda iš 3, 4 ar net 5 vakansijų:



Fermi lygmens padėtis priklauso nuo švitinimo dalelių kiekio. Fermi lygmuo yra netoli draustinės juostos: $E_c - 0,5 \pm 0,02$ eV. Toliau švitinant mėginėlius Fermi lygmuo kinta: nuo $-0,5$ eV iki $+0,4$ eV (100 – 160 °C).

1.2.9. Daugjavakansiniai kompleksai su deguonimi

Apspinduliuotame silicyje paramagnetiniai centrai, kurių formavimasis priklauso nuo deguonies sudėties, atitinka kompleksus: divakansija – deguonis, divakansija – du deguonies atomai, kompleksai ir vakansijos (vienas, du ar trys deguonies atomai) [8]. Kaip jau minėta anksčiau, vakansijų ir divakansijų atkaitinimas vyksta 250 – 350 °C temperatūroje. Yra manoma, kad vakansijos $V_2 + O$ pagava vyksta, kai atkaitinant išsilaisvina V_2 . Ji veda link $V_2 + O + O = V_3 + O$ komplekso kūrimosi. Esant tokiai temperatūrai yra atkaitinami A – centrai, todėl gaunama tokio tipo išraiška: $V_2 + O + O = V_2 + O_2$. Gautasis kompleksas yra žemos koncentracijos, nes didžioji dalis deguonies grįžta į tarpmazginę padėtį kristale. Esant aukštesnei temperatūrai, kompleksas $V_2 + O_2$ transformuojasi į $V_3 + O_2$ ir $V_3 + O_3$ centrus.

1.2.10. Si – O_i kompleksas apšvitintame Cz – Si kristale

Toks defektas deformuojasi, kai kystalas yra švitinamas žemose temperatūrose. Centras būna stabilus esant 250 K temperatūrai. Duomenų analizės atskleidžia, kad toks kompleksas formuojasi taip: Si_i išsilaisvina ir deguonies atomai tampa Si_i atomų prilipimo centrais. Pats kompleksas gali būti dviejų konfigūracijų, turi tris skirtingas simetrijos struktūras.

Skirtingose medžiagose susikūrę defektai skirtingai veikia laidumą. Pvz., kai defektai būna akceptoriniai, kristalai tampa n – tipo laidumo, padidėja jų varža. Naujai susikūrę defektai turi kelis energetinius lygmenis.

1.3. Radiacijos poveikis taškiniams defektams

Kuriant defektus minkštaisiais Rentgeno spinduliais, labai svarbi yra kristalo paviršiaus įtaka, nes šitų spindulių skverbtis nėra didelė [1]. Kaip žinoma, didelės energijos dalelės silicyje kuria defektus, susidurdamos su gardelės atomais. Slenkstinė elektrono energija, kuri išmuša atomą į tarpmazgį yra ~ 250 keV. Tačiau įmanoma, kad ir mažesnės energijos elektronai pakeistų krūvininkų pernašos Si savybes.

Atomų išmušimas priklauso nuo kelių faktorių: sąveikaujančių dalelių energijos, kristalo orientacijos, švitinimo krypties. Tūrinis spinduliavimas neturėtų kurti defektų, nes tokių energijų kvantai pirmiausia kuria foto- ir Komptono elektronus, kurių energija yra žymiai mažesnė nei energija, reikalinga išmušti atomą iš gardelės mazgo.

Elektrono sužadimas iš Si sluoksnio laidumo ar valentinio lygmens į oksido lygmenis ir jo pagavimas yra susijęs su oksido sluoksnio neigiamu krūviu. Tačiau drauge vyksta ir oksido sluoksnio rentgeninis žadinimas – greitų paviršinių lygmenų išskrovimas. Bandinį apspinduliuavus 10 keV rentgeno spinduliais, dėl besikuriančių defektų yra stebimas oksido sluoksnio išsikrovimas [1].

Išlaisvinus elektroną iš gilesnių lygmenų, pasikeičia ir atomų tarpusavio sąveika – atsiranda daugiau laisvės paviršiniams atomams keisti padėtį, atsiranda papildoma stūma, kuriasi paviršiniai defektai. Pastariesiems formuotis nereikia tiek daug energijos kaip tūriniais defektams. Sužadintų atomų barjeras peršokti į tarpmazgį sumažėja sulig jonizacijos laipsniu. Tačiau labiau jonizuotam atomui kristale gyvavimo trukmė taip pat sumažėja. Tokiam defektui susikurti reikalinga vos keletu eV energija. Jėga, reikalinga sukurti tokį defektą, yra apie $1 \text{ eV}/\text{Å}$ per laiką, atitinkantį tos gardelės svyravimo dažnį $\sim 10^{-13}$ s. Tuo tarpu smūginiam atomo išmušimui reikalingos daug didesnės jėgos, nes sąveikos laikas yra kur kas trumpesnis.

Karpovas ir Klingeris analizavo taškinių defektų atsiradimą dėl jonizuoto magnio ir greta esančio sužadinto priemaišinio atomų kuloninės sąveikos [1]. Autoriai padarė išvadą, jog Ože proceso metu neterminė jonizuoto atomo išmušimo tikimybė padidėja, jeigu šalia esti priemaišinis atomas. Kiti mokslininkai (Milevskis ir Garnikas) aptiko, jog Si monokristaluose Frenkelio poros išskiriamos švitinant elektriniu lauku. Eksperimentas buvo atliktas apšvitinant dalį kristalo 2,2 MeV elektronų srautu ir matuojant elektrovarą (EV). Prijungus išorinį lauką, EV išauga daugiau negu eile. Kadangi Frenkelio poros sudedamosios dalys yra priešingų krūvių, jų anihiliacija priklauso nuo elektrostatinės tarpusavio sąveikos. Taigi defekto komponentų kuriamas laukas ir išorinis laukas yra priešingų krypčių.

Taip pat nereiktų pamiršti kvantinio našumo sąvokos. Esant švitinimui kuriasi papildomi krūvininkai – juos sukuria fotonai. Jeigu yra švitinama fotonais, kurių energija nedaug didesnė negu žadinimo iš valentinės į laidumo juostą, tuomet kvantinis našumas išlieka pastovus. Taip yra kuriamos elektronų ir skylių poros. Tačiau didinant fotonų energiją, didėja sukurtų krūvininkų kinetinė energija. Pastaroji netrukus būna išaikvojama dėl sąveikos su gardele – kristalas šyla. Tačiau energija gali išaugti ir tiek, kad jos užtenka jonizuoti naujiems atomams. Porai susikurti reikalinga energija visiškai nepriklauso nuo to, kokios energijos kvantai ją kuria, jeigu tie fotonai yra pakankamai didelių energijų. Kadangi elektronas, turintis didesnę energiją, mažiau sąveikauja su gardele. Tačiau didėjant energijai, didėja ir jonizacijos tikimybė. Matyti, kad pirmiausia yra kuriami nauji krūvininkai, šildoma gardelė. Kai energija dar padidėja, tuomet galimas defektų kūrimasis.

Skirtingose medžiagose susikūre defektai skirtingai veikia kristalo laidumą. Pvz., jei jie būna akceptoriniai, kristalas tampa p laidumo tipo; n laidumo tipo silicio kristale dėl to padidėja varža. Naujai susidare defektai turi keletą energetinių lygmenų.

Nejonizuoto defekto kūrimosi energija paprastai yra didesnė nei elektrono pagavimo iš laidumo juostos į lokalinį to defekto lygmenį [1]. Kai laidumas mažėja dėl kompensuojančių defektų atsiradimo, reiškinys vadinamas *savikompensacija*. Pertekliniai elektronai atsiranda jonizuojant donorines priemaišas, gardele. Kristalą veikiant jonizuojančiąja spinduliuote, savųjų defektų koncentracija turi didėti dėl terminių defektų kūrimosi mechanizmų, dalyvaujant sužadintiems elektronams. Įmanoma ir fotolaidumo savikompensacija.

Defektų migracija gali būti paspartinama vykstant gardeles relaksacijai dėl nespindulinės daugiafononinės sužadintų krūvininkų rekombincijos. Tokiu atveju sužadinimas yra kuriamas šildant puslaidininkį, kai draustinėje juostoje esantis gilus lygmuo pakyla iki laidumo juostos ir pasigauna elektroną.

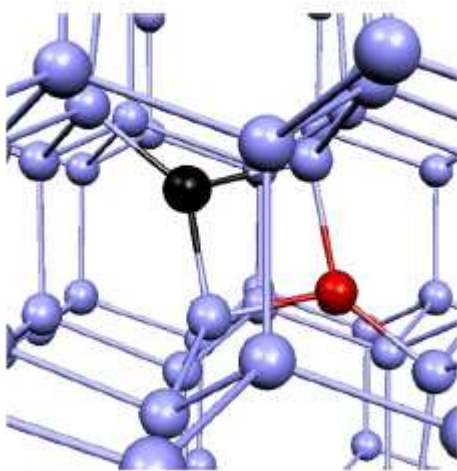
2. Taškinių defektų reakcijos

Kristalus švitinant didelės energijos dalelėmis egzistuoja tokia energijos riba, ties kuria pasidaro nebesvarbu, kokios rūšies dalelės kuria defektus, nes jie vis tiek yra tokie patys – vakansijos ir tarpmazgiai [1]. Vykstant susidūrimams su branduoliais yra nesvarbu, kas jį išmuša, kadangi tolimesnė sąveika yra tarp krūvį turinčios „skeveldros“ ir paties kristalo.

Vykstant švitinimui kuriasi taškiniai defektai, kurie tarpusavyje jungiasi į stambesnius junginius. Atliekant eksperimentus esant įvairioms temperatūroms, galima identifikuoti junginių terminius stabilumus bei atskirti, ką jie reiškia matuojamiems parametrams.

2.1. Anglies ir deguonies defektų reakcijos

Kaip žinoma, anglis yra specialiai neįvedinėjama priemaiša, esanti silicio kristaluose. Auginant kristalus, ji užima mazginę (žym. C_i) padėtį (IR spektre ties 605 cm^{-1}). Apšvitinus kristalą, ji šoka į tarpmazgį (žym. C_s), o kambario temperatūroje (KT) ji greitai migruoja ir gali jungtis į kompleksus. Tarpmazginė anglis, jungdamasi su tarpmazginiu deguonimi (O_i), mazgine anglimi ar kitais III, IV grupės elementais formuoja kelių rūšių kompleksus (7 pav.): C_iO_i , C_iO_s ir pan.

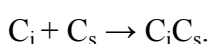
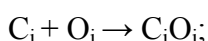


7 pav. C_iO_i kompleksas. Silicio atomai mėlsvi, deguonies atomai – raudoni, anglies atomas juodas [20]

Vienas iš gerai žinomų defektų – IC_iO_i (Si atomas pagautas didesnėje C_iO_i sancaupoje žymimas C4) nustatomas IR sugertyje [1]. Tokio defekto stabilumas išsilaiko iki 450 K. C_i , kaip minėta, yra judrus KT, susijungia su O_i ir sudaro C3 defektą C_iO_i . Šio komplekso donorinis lygmuo

yra $E_v + 0.38$ eV [21]. Kambario temperatūroje jo IR spektrai yra sunkiai pastebimi. IC_iO_i stabilios juostos laikosi iki 150 °C, tuomet atsiranda 3 naujos linijos: $724, 952, 973$ cm^{-1} . Dar labiau pakėlus temperatūrą (iki 250 °C), anksčiau minėtos linijos pasikeičia į 951 (anglies), 969 (deguonies), 977 (anglies) cm^{-1} . Esant ~ 300 °C temperatūrai šios linijos ima nykti, VO ir C_iO_i pradeda atsikaitinti. Iš IC_iO_i susidaro stabilesni kompleksai.

Atkaitinant tarpmazginę anglį vyksta tokios reakcijos:



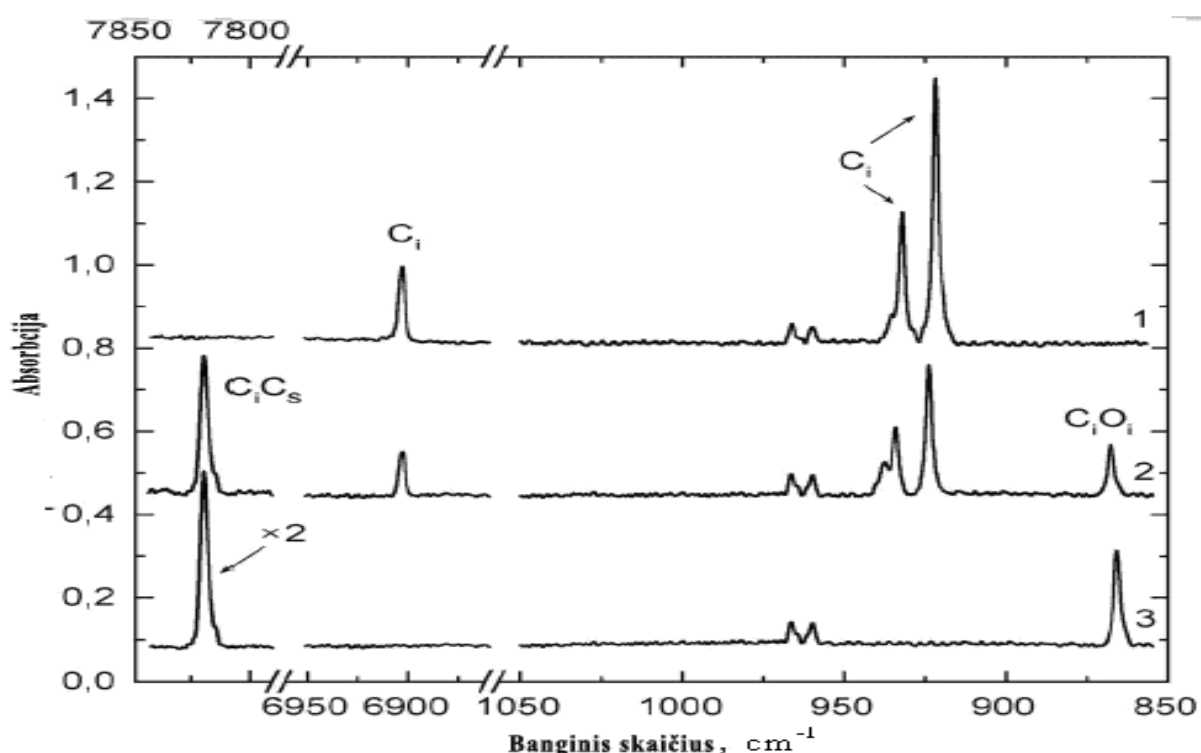
Didinant švitinimo dozę, C_i , C_iO_i , C_iC_s veikia kaip tarpmazgių nusėdimo centrai. Buvo pastebėta, kad C_iC_s centras yra stipresnis, kai kristalas yra apšvitinamas neutronais, o ne elektronais [22]. Didžioji dalis pirminių porų (po švitinimo elektronais) anihiliuoja ir labai nedidelė jų dalis reaguoja su kitais defektais. Tuo tarpu po apšvitinimo neutronais anihiliacija yra kur kas silpnesnė dėl pirminių defektų komponentų didesnio išskyrimo tūryje. C_iC_s yra metastabilus centras ir gali egzistuoti dvejose būsenose: A ($594.6, 596.9, 722.4, 872.6, 953$ cm^{-1}) ir B ($540.4, 543.3, 579.8, 640.6, 730.4, 842.4$ cm^{-1}) [23]. Dėl mažo intensyvumo šios linijos matomos tik kriogeninėse temperatūrose, tačiau linija 544 cm^{-1} (priklausanti C_iC_s centrui) buvo pastebėta kambario temperatūroje. Taip pat buvo nustatyta, kad IC_iC_s yra stabilus iki 300 °C. Kristalą paveikus didesnėmis švitinimo dozėmis formuojasi defektai su silicio atomais. Juos atkaitinant buvo nustatyta, kad IC_i ir IC_iO_i išnyksta ties 150 °C, naujos juostos nesiformuoja. C_iC_s ir IC_iC_s išnyksta ties 250 °C ir susiformuoja 2 poros naujų juostų – 919 ir 1006 cm^{-1} , 945 ir 964 cm^{-1} . Esant dar didesnei temperatūrai (~ 700 °C), tarpmazginė anglis sąveikauja su VO centru ir formuojasi nauji kompleksai [24]:



Neutronais apspinduliuotame silicyje Fermi lygmuo artėja į draustinių juostų vidurį, todėl kompleksas C_iC_s gali egzistuoti kaip neutralus, atitinkantis B konfigūraciją. Nustatytoji 544 cm^{-1} linija KT atitiktų B konfigūracijos linijų (540.3 ir 543.3 cm^{-1}) kombinaciją. 540 cm^{-1} linija priskiriama C_iO_i kompleksui, nes atkaitinimo elgsena yra tokia pati kaip su C_iO_i susijusių defektų.

Kaip žinoma, tarpinis silicis (I) yra vienas iš defektų, kuris yra randamas kristale švitinant aukštoje temperatūroje. Jis gali prisijungti C_i ir taip sudaryti naujus centrus.

Taip pat buvo nustatyta, kad tarpmazginė anglis silicio kristaluose gana efektyviai sąveikauja su alavo ar germanio atomais ir sudaro kompleksus – C_iSn_s , C_iGe_s . Alavo ir tarpmazginės anglies sąveika: $C_i + Sn_s \rightarrow C_iSn_s$. Sn energija silicyje yra 0.75 eV, o tarpmazginės anglies – 0.77 eV. 8 paveiksle matyti absorbcijos spektras apšvitintame silicyje; temperatūrų kitimo intervalas 240 – 380 K [25]. Pirma kreivė 240 K temperatūroje vaizduoja tarpmazginės anglies intensyvumus (922, 931 ir 6903 cm^{-1}). Centras C_iSi_i turi mažesnio intensyvo absorbcijos linijas.



8 pav. Absorbcijos spektras apšvitintame silicio kristale. Temperatūra: 1 – 240 K; 2 – 260 K; 3 – 305 K; 4 – 380 K [25]

$C_z - Si$, apšvitintame neutronais, esti daug metastabilių defektų – tokių kaip vakansija (V), tarpinis silicis (I), kurie gali formuoti įvairius kompleksus su tarpmazginiu ar mazginiu deguonimi. Tarpinis silicis ir tarpmazginis deguonis atlieka labai svarbų vaidmenį defektų formavimosi procesuose. Kai tokie bandiniai yra apšvitinami 80 K temperatūroje, išryškėja trys linijos IR absorbcijos spektre – 936, 944 ir 956 cm^{-1} . Ge ir Sn priemaišų buvimas niekaip neveikia šių linijų formavimosi. Anglies kiekis ženkliai sumažina šių linijų susidarymą [26].

Kur kas stabilesni defektai yra su O_i , nes tarpmazginio silicio susidarymą galima apibūdinti kaip deguonies pokyčius esant žemoms temperatūroms. Tokia prisotinta vakansija gali turėti įtakos deguonies nusodinimo procesui ir taip pat padidinti deguonies išsiklaidymą. Taip gali būti pagreitinami deguonies nusodinimo procesai. Ypač po atkaitinimo 1000 – 1500 °C temperatūroje po apšvitinimo neutronais [27].

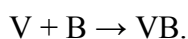
Žinoma, kad O_i pagauna tarpmazginį silicį į naują kompleksą IO_i , kuris gali išlikti stabilus ir žemesnėje negu 300 K temperatūroje. Tokio komplekso IR spektro absorbcijos linijos yra 960, 966 ir 953 cm^{-1} . Tuo tarpu apšvitinus Cz – Si 80 K temperatūroje išryškėja 3 linijos ties 936, 944 ir 956 cm^{-1} . Jos irgi yra priskiriamos IO_i kompleksui [28]. Šis defektas dar gali pagauti papildomą tarpmazginį silicio atomą ir suformuoti naują kompleksą I_2O_i .

Yra žinoma, kad deguonies priemašos švitinant gerai reaguoja tiek su V, tiek su I. C_s reaguoja su I pavirsdama į C_i . Reakcija su vakansija dar nėra nustatyta.

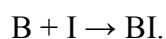
Literatūroje taip pat yra minima nemažai V kompleksų su kitomis priemaišomis (P, As, Sb, B, Al, Ge, Sn). Apšvitinus neutronais kristalą, kuriame gausu V, yra tikėtina, kad C_s jungiasi su V, todėl linija 943 cm^{-1} priskiriama C_sV kompleksui. Silicyje, kuriame yra mažesnis deguonies kiekis, ši linija stebima stipresnė.

Vakansijos taip pat jungiasi prie anglies defektų: $C_iC_s + V = C_sC_s$. Šis krūvio neturintis defektas IR spektre pasireiškia ties 527 cm^{-1} kambario temperatūroje [29].

Silicio kristaluose boras taip pat yra įprastinė priemaiša. Draustinėje juostoje jis kuria seklių lygmenį, tačiau dalis boro vis dėlto yra elektriškai neefektyvus. Apspinduliuojant B_s sąveikauja su tarpmazginiu siliciu. Taip susikuria tarpmazginis B_i . Migruodama vakansija prisijungia borą:

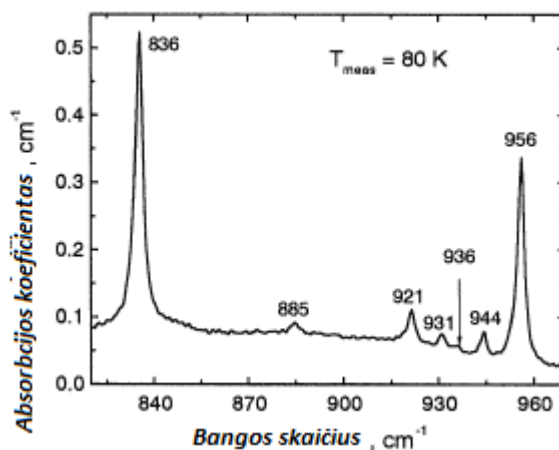


Toks kompleksas nėra stabilus KT. Yra žinoma, kad I gali jungtis su boru į kompleksą:

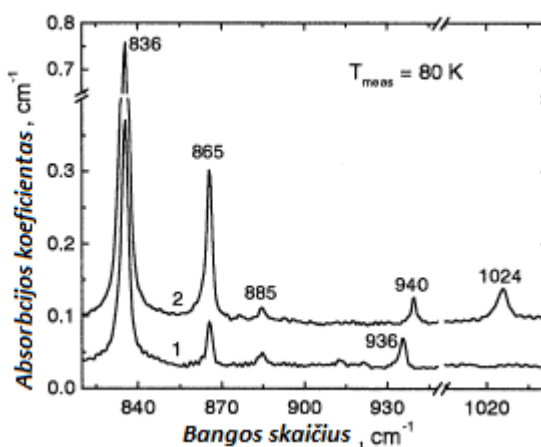


Taip pat yra žinoma, jog savasis mazginis silicis jungiasi su mazginiu boru. Toks kompleksas išlieka stabilus maždaug 230 K temperatūroje. Neigiamai įkrautas B atomas yra gaunamas šitaip: $I + B_s^- \rightarrow B_i^-$. B_i^- stabilus išlieka KT, o defektas B_i^0 yra atkaitinamas per 30 minučių esant 300 K temperatūrai.

Yra atlikti tyrimai su Si kristalu, kuriame deguonies koncentracija $9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, anglies – $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ [30]. Švitinimas elektronais buvo atliktas 80 K ir kambario temperatūroje. Duomenis galima pamatyti 9 paveiksle.



9 pav. Si, apšvitinto elektronais 80 K temperatūroje, absorbcijos spektras [30]



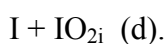
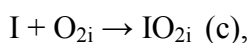
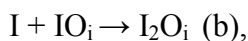
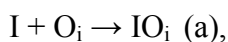
10 pav. Si, apšvitinto elektronais 80 K temperatūroje (1) ir atkaitinto KT 12 valandų, švitinto KT (2), absorbcijos spektras [30]

Didžiausias dėmesys skiriamas 936 cm^{-1} smailei. Jos intensyvumas labai žemas ir pastebimi tik silpni pikai, esant žemai temperatūrai. Po atkaitinimo kambario temperatūroje (12 valandų) šios juostos stiprumas pastebimai išaugo (10 pav.). Tuo tarpu 836 cm^{-1} smailės intensyvumas sumažėjo. Be to, smailė 865 cm^{-1} (priklausanti C_iO_i) atsirado spektre po atkaitinimo. Tokių smailių atsiradimas po atkaitinimo yra siejamas su 944 ir 956 cm^{-1} (jos siejamos su IO_i), 921 ir 931 cm^{-1} smailių dingimu (jos siejamos su C_i). Taip pat aiškiai matyti, kad nėra jokių 936 cm^{-1} smailės

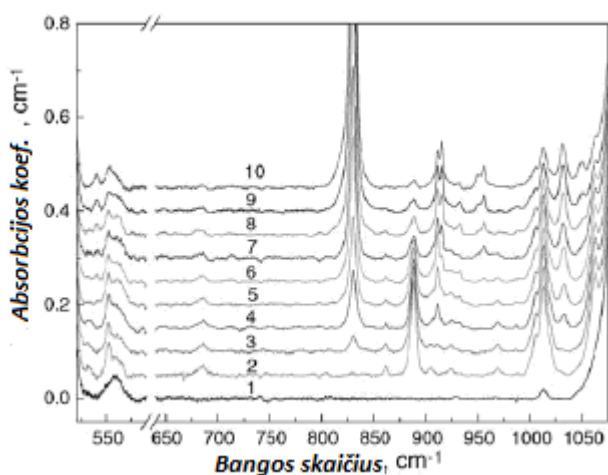
pėdsakų kamabario temperatūroje švitintame mėginyje, tačiau yra kitos dvi smailės – 940 ir 1024 cm^{-1} . Šios linijos priskiriamos IC_iO_i .

Apskritai boro ir anglies atomai tampa tarpmazginių atomų pagavos centrais. Esant judrioms vakansijoms, galima ir tokia reakcija: B_i grįžta į B_s padėtį. Švitinant vakansijas atsiranda vienodas kiekis tarpmazginių kompleksų.

Taip pat yra skirtumai tarp kristalų prisotintų ir nuskurdintu anglies priemaišomis. Silicyje su nuskurdintu anglies kiekiu, apšvitintame 650 K temperatūroje, VO kompleksų koncentracija yra daug mažesnė negu O_{2i} . Pagrindiniai I pagavos centrai yra būtent O_{2i} . Ypač tai matyti pakartotinai švitinant 300 K temperatūroje, kai vyksta tokios reakcijos [31]:

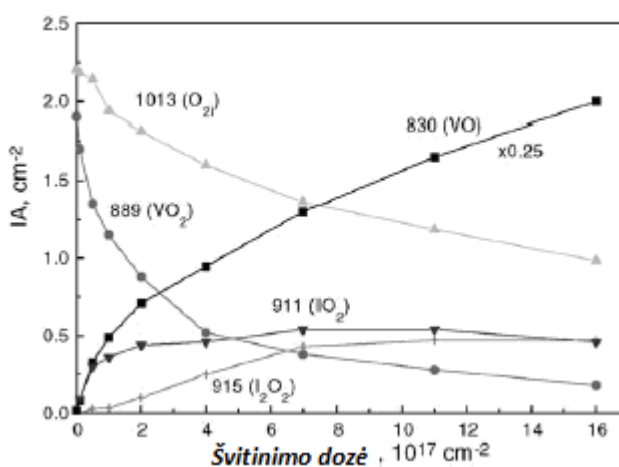


Kompleksas IO_i nėra stabilus maždaug 300 K temperatūroje, taigi (a) ir (b) reakcijos nėra efektyvios, kai švitinama tokioje temperatūroje. Tada pagrindinėmis reakcijomis tampa (c) ir (d) reakcijos. Tolimesnis švitinimas tokioje temperatūroje leidžia toliau augti VO centrams.



11 pav. Cz – Si kristalo (nuskurdintas anglimi) KT absorbcijos spektrai: 1 – prieš švitinimą, 2 – po švitinimo, atlikto 350 $^{\circ}\text{C}$ temperatūroje. $F(\text{cm}^{-2})$: (3) 1×10^{16} , (4) 5×10^{16} , (5) 10^{17} , (6) 2×10^{17} , (7) 4×10^{17} , (8) 7×10^{17} , (9) 1.1×10^{18} , (10) 6×10^{18} [31]

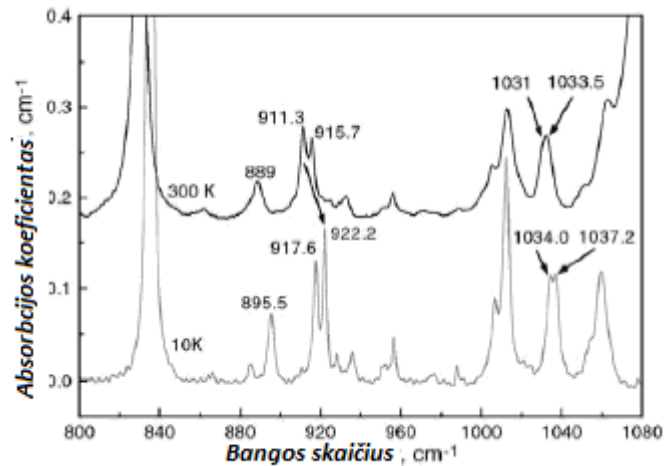
Stiprus O_{2i} koncentracijos augimas po švitinimo leidžia lyginti jo koncentraciją su VO_2 komplekso koncentracija (889 cm^{-1}). Gerai žinoma VO smailė (830 cm^{-1}) nėra matoma spektre (11 pav.). Atsiranda naujų smailių esant KT (3 - 10) (11 pav.). Yra tikimasi, kad pirmoji smailių pora atsiranda, kada IO_{2i} kompleksas pradeda formuotis iš trečios ir paskui ketvirtos reakcijų susidaro I_2O_{2i} [31]. Taip pat matyti silpna smailė ties 540 cm^{-1} . Kai švitinimo dozė ima augti, VO kompleksų koncentracija greitai išauga ir su VO kompleksu susijusi linija ties 830 cm^{-1} greitai ima dominuoti spektre (6 – 10 linijos). Taip pat tai yra iliustruota ir (12 pav.) susijusių juostų kinetikos generavimų intensyvumų priklausomybės nuo švitinimo dozių.



12 pav. Radiacijos indukuotų deguonies kompleksų kinetikos generavimas po švitinimo kambario temperatūroje dimerais prisotintame Cz – Si pavyzdėlyje [31]

Nustatytos priklausomybės gali būti nusakomos trečia, ketvirta ir $I + VO_2 \rightarrow O_{2i}$, $I + VO \rightarrow O_i$ reakcijomis, atsižvelgiant skirtumus, kuriuos sukelia VO , VO_2 , O_{2i} , IO_{2i} , gaudydami tarpmazginius deguonies atomus. Šie grafikai atskleidžia, jog smailių poros (911 ir 1034 cm^{-1}) ir (916 ir 1031 cm^{-1}) yra susijusios su deguonimi.

13 paveiksle matyti, kaip temperatūros pokytis nuo 10 iki 300 K pakeičia smailių padėtį: 911 cm^{-1} smailė pasislenka į 922 cm^{-1} padėtį, tuo tarpu 916 cm^{-1} smailė pasislenka į 918 cm^{-1} .



13 pav. Absorbcijos spektras (matavimai atlikti 10 ir 300 K temperatūroje) anglimi nuskurdintame Cz – Si kristale, kuris buvo švitinamas KT ir 350 °C temperatūroje [31]

Tokie tipiniai su deguonimi susiję poslinkiai (13 pav.) yra maždaug 5 – 6 cm^{-1} dydžio. Išimtis yra LVMs ties 1012, 1060 cm^{-1} , atitinkantys deguonies dimerus. Temperatūros pokyčiai jiems yra minimalūs [32].

Pati svarbiausia priežastis, dėl kurios yra skirtumas tarp nukurdinto ir praturtinto anglimi Si kristalo vykstant švitinimui, yra efektyvi reakcija (dar vadinama Watkins'o pakeitimo mechanizmu):

$C_s + I \rightarrow C_i$ (priskiriama 922, 932 cm^{-1} smailėms). Atsižvelgiant į šios reakcijos efektyvumą, kitos reakcijos (kaip $I + VO \rightarrow O_i$) yra numalšinamos ir išaugusi VO ir divakansijų koncentracija gali būti tikėtina esant aukštesnėms švitinimo dozėms, kada C_i pagauna I ir leidžia augti LVMs (local vibration modes) smailėms ties 959 ir 966 cm^{-1} [7].

2.2. VO kompleksų reakcijos

Gerai žinoma, kad pagrindinis faktorius, nusakantis radiacinių defektų tipą, yra švitinimo temperatūra [33]. Kada temperatūra yra žema (<170 °C), pagrindiniai vakansijų tipo defektai yra V-, V₂-, V₄-. Kai temperatūra yra aukšta (>170 °C), pagrindiniai defektai yra multivakansiniai defektai V₅-.

Šiuo metu VO defektas – vienas labiausiai tyrinėjamų kompleksų. Yra žinoma, kad šis defektas į draustinę juostą įneša akceptorinį lygmenį $E_c = 0.17 \text{ eV}$. Toks spektras gali būti įvairiai

analizuojamas (EPR, IR absorbcijos). Vakansijos – deguonies centras yra pagrindinis kompleksas po švitinimo neutronais.

Čiokralskio kristalo A - centro atkaitinimas vyksta dviem etapais. Visų pirma Cz – Si yra apšvitinamas neutronais, O_i pagauna VO. Pamažu didinant apšvitinimo dozę, kristale ima daugėti vakansijų VO pavidalu, kurios yra labai silpnai susijungusios su O_i . Galima daryti išvadą, kad O_i intensyvumas ima mažėti ir transformuojasi į VO. Antra, vakansijos – deguonies kompleksas pagauna klajojančias vakansijas, kai kristalas yra apšvitinamas didelėmis neutronų dozėmis. Esant žemoms temperatūroms, 835 ir 885 cm^{-1} linijos yra priskiriamos VO kompleksui, kuris turi neigiamą krūvį [26]. Tačiau esant 300 $^{\circ}\text{C}$ temperatūrai toks centras išnyksta ir išryškėja kompleksas VO_2 . Galima daryti išvadą, kad VO kompleksas, esant aukštai temperatūrai, atlieka labai svarbų vaidmenį prisijungiant deguonį [34]. VO_2 komplekse du deguonies atomai apjungia 4 nutrauktus vakansijų ryšius. Taigi deguonies atomai užima ekvivalentines padėtis ir yra susiję su kitais dviem silicio atomais.

Esant švitinimui KT, I difunduoja didesniu greičiu, taigi pagrindiniai radiaciniai defektai yra V tipo. Tačiau I tipo defektai yra „pažeistuose“ regionuose. Defektai, sukurti esant švitinimui neutronais, pakeičia originalią defektų ir priemaišų būseną Si kristale. Atkaitinimo metu šalinant radiacinius defektus kristale, deguonies ir priemaišų elgesys pakinta. Defektų klasteris, indukuotas neutronų, gali pagreitinti deguonies atomų difuziją ir precipitātų formavimąsi bei formuoti nepriekaištingą nuskurdintą zoną Cz – Si kristale, esant aukštos temperatūros atkaitinimui [35].

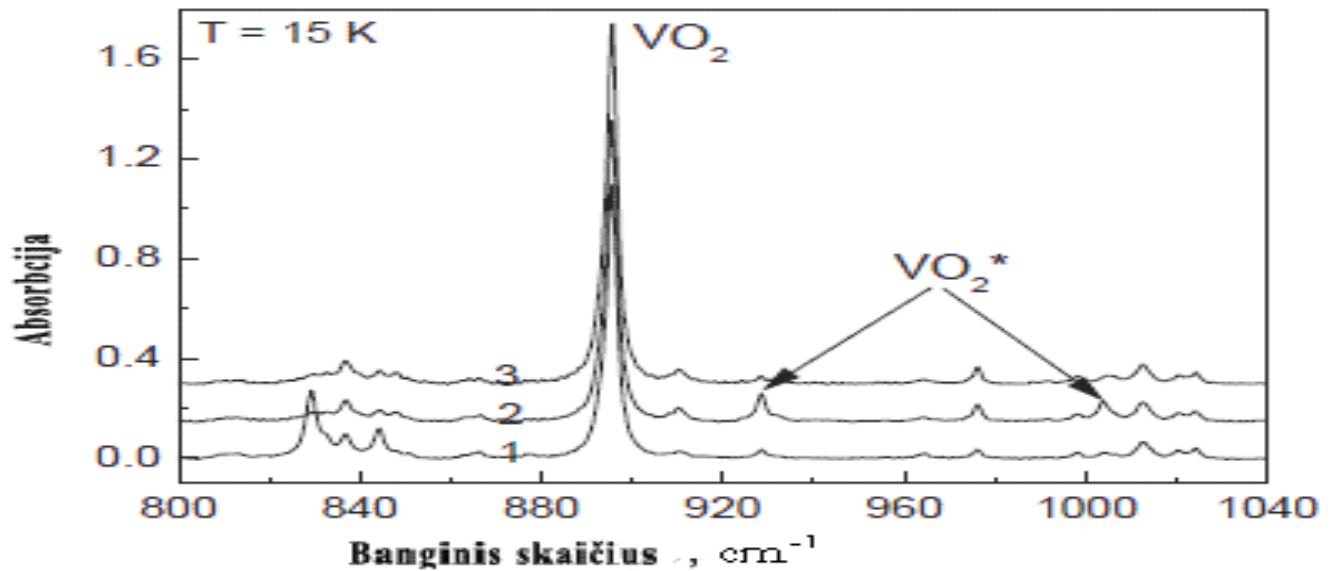
Literatūroje [36] yra pristatomi įvairūs atominiai VO_2 komplekso modeliai, kuriuose deguonies atomai egzistuoja skirtingose padėtyse. VO_2 absorbcijos linijos nurodomos 914 ir 1000 cm^{-1} . Tuo tarpu kiti šaltiniai [22] nurodo truputį kitus duomenis – 919.6 ir 1008.9 $\text{cm}^{-1}(\text{KT})$.

Esant 15 K temperatūrai VO_2 komplekso linijos yra 895.5, o 889 cm^{-1} KT. VO ir VO_2 vaidmuo deguonies nusodinimo ir išsisklaidymo procese yra itin svarbus. FT – IR spektrometru galima išmatuoti pakitimus, kurie susidaro kristalą apšvitinus tam tikra spinduliuote. Čiokralskio kristaluose, apšvitintuose elektronais, stebimos dvi linijos: 15 K ties 928 cm^{-1} ir 923 cm^{-1} esant KT. 14 paveiksle pavaizduoti Cz – Si kristalo spektrai, kai $[O_i]=1 \times 10^{18}$, $[C_s]=4 \times 10^{16}$. Pavyzdėliai atkaitinti:

1. 320 $^{\circ}\text{C}$ temperatūroje 30 h, prieš tai buvo švitinami 2 MeV elektronais kambario temperatūroje;

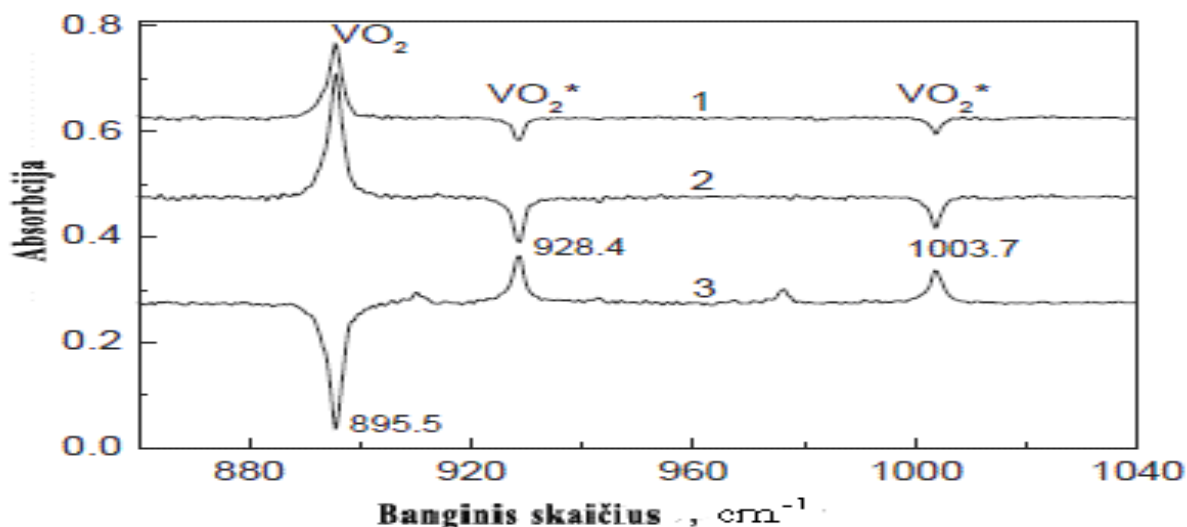
2. 480 °C temperatūroje 5 min;

3. 250 °C temperatūroje 50 h.



14 pav. Absorbancijos spektrų fragmentai Cz – Si mėginėliui po švitinimo 2 MeV elektronais KT [34]

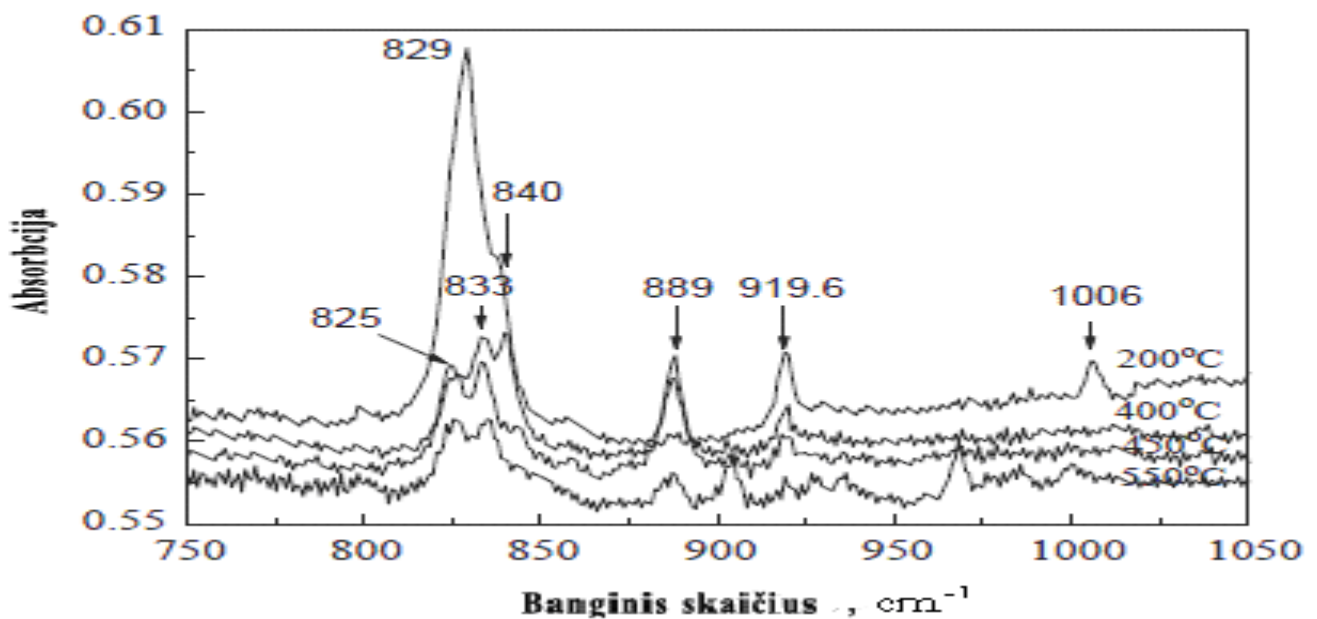
Iš 14 paveikslo matyti, kad yra fiksuojama silpna linija ties 928.4 cm^{-1} drauge su dominuojančia VO_2 linija ties 895.5 cm^{-1} . Pastarosios intensyvumas išauga po penkių minučių atkaitinimo. Taip pat rastos ir kitos dvi linijos 928 ir 1003.8 cm^{-1} (1000 cm^{-1} esant KT). Pastarasis gerai koreliuoja su 928 linija atkaitinimo metu. Esminis sumažėjimas abiejose linijose 928 ir 1004 cm^{-1} yra nustatytas po atkaitinimo 250 °C temperatūroje, kuris yra palydimas tuo pat metu vykstančio 895 cm^{-1} linijos augimo. Šios transformacijos puikiai matosi 15 paveiksle.



15 pav. Skirtumai tarp absorbcijos spektrų fragmentų. Pavyzdėliai atkaitinti: 1. 320 °C temperatūroje 30 h, prieš tai buvo švitinami 2 MeV elektronais kambario temperatūroje; 2. 480 °C temperatūroje 5 min; 3. 250 °C temperatūroje 50 h [34]

Svarbus pastebėjimas - jie yra grįžtamo ryšio. Atkaitinimo sekos 480 – 250 – 480 – 250 °C buvo kartojamos kelis kartus, tačiau spektruose pasikeitimai nebuvo užfiksuoti (15 pav.) (VO₂ anihilacija esant 480 °C temperatūrai vyksta labai lėtai). Eksperimentatorių [34] manymu, VO₂ kompleksas yra bistabilus ir pasirodo dviejose skirtingose konfigūracijose – viena įprastinė (928 cm⁻¹) ir VO₂^{*} (1004 cm⁻¹). Gana aukštas potencialinis barjeras skiria šias konfigūracijas. Transformacija iš VO₂^{*} į VO₂ prasideda esant maždaug 250 – 300 °C temperatūroje.

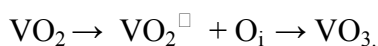
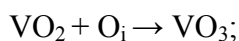
VO₂^{*} yra elektriškai aktyvus VO centras, turintis neutralią ar neigiamą būseną. VO₂^{*} kompleksas gali būti analizuojamas ir kaip VO centras su greta esančiu O_i [24]. Pabrėžiama, kad esant 300 °C temperatūrai, nyksta VO ir yra stebimas besiformuojantis VO₂ ties 889 cm⁻¹ arba KT ties 895.5 cm⁻¹. VO₂ gali būti mobilus. Tokią būseną atitinka 928 ir 1004 cm⁻¹. 16 paveiksle pavaizduotas FT – IR spektras silicio mėginėlių atkaitinant 200 – 500 °C temperatūrų ruože [24].



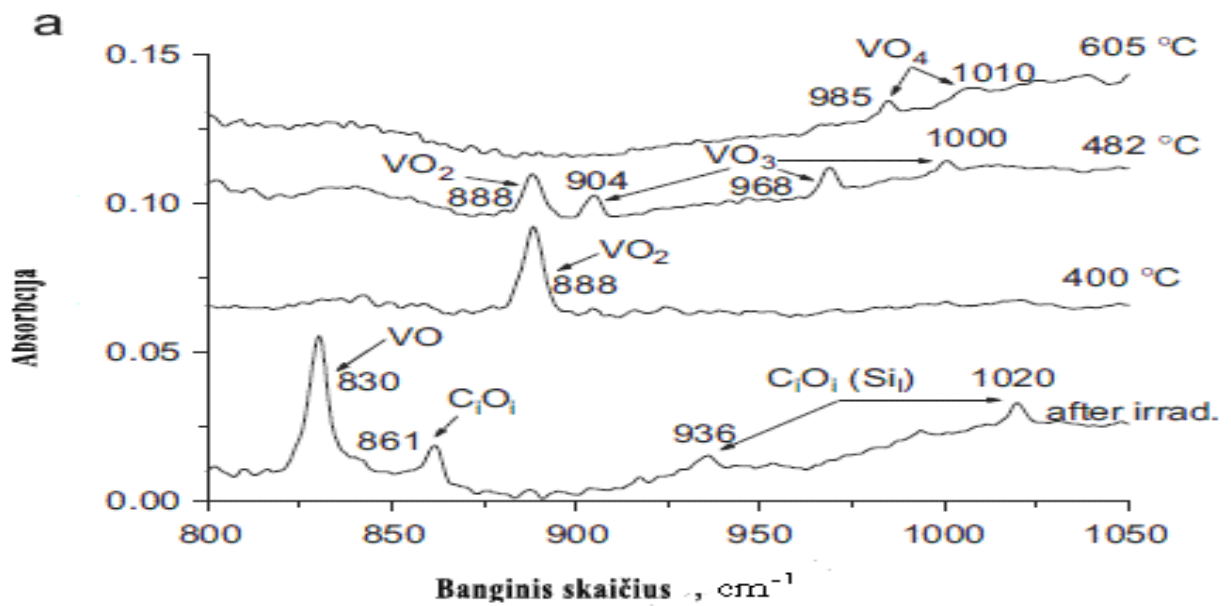
16 pav. FT – IR spektras, silicio kristalą atkaitinant 200 – 500 °C temperatūroje [24]

Kristalų plokštelės prieš švitinimą buvo nupoliruoti rūgštimi ($\text{HNO}_3:\text{HF}=6:1$) [24]. Tada bandiniai buvo apšvitinti mažomis dozėmis neutronais 45 °C temperatūroje. Po švitinimo vėl buvo šveičiami HF rūgštimi, kad pašalintų paviršių, susidariusį švitinimo metu. VO absorbcijos juostos (829 ir 919.6 cm^{-1}) formuojasi, kai bandinys yra atkaitinamas 200 °C temperatūroje. Pastarasis išryškėjimas gali būti susijęs su metastabiliu V_2O kompleksu: $\text{VO} + \text{V} \rightarrow \text{V}_2\text{O}$.

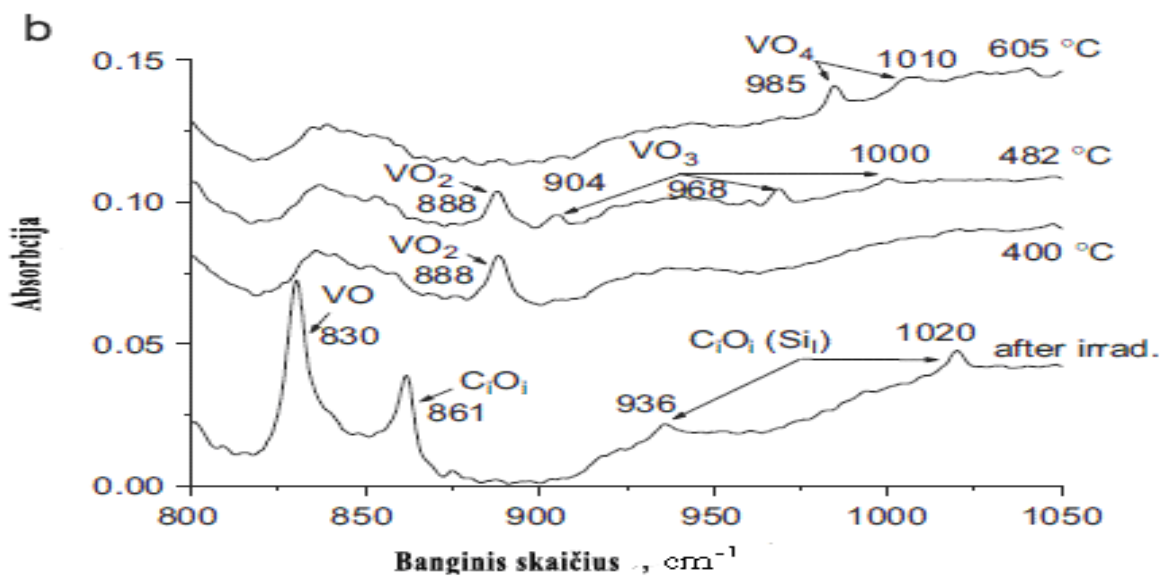
A – centras silpnina teminio donoro formavimą, kada Cz – Si yra apšvitinamas neutronais 450 °C temperatūroje. Toliau tęsiant švitinimą, vakansijos yra pagaunamos A – centro, taip formuojasi V_2O . VO ir V_2O anihiliacija vyksta esant 300 – 400 °C temperatūrai. Linijų 840 ir 919.6 cm^{-1} intensyvumas yra siejamas su A – centru, V_2O ar VO_2 kompleksu, prisijungiant V, V_2 ar O_i [24]. Tai yra labai svarbu, kai yra analizuojami tokie perėjimai:



Taip pat gali būti tiriamas šiluminis poveikis multideguoniniam – vakansijos centrui VO_n , kuris susiformuoja elektronais apšvitintus Cz – Si bandinius, turinčius germanio priemaišų. Buvo naudojami bandiniai turintys didelį ($2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$) ir mažą kiekį ($< 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) Ge atomų. Tai vaizduoja 17 ir 18 paveikslai, su juose nurodytomis atkaitinimo temperatūromis.



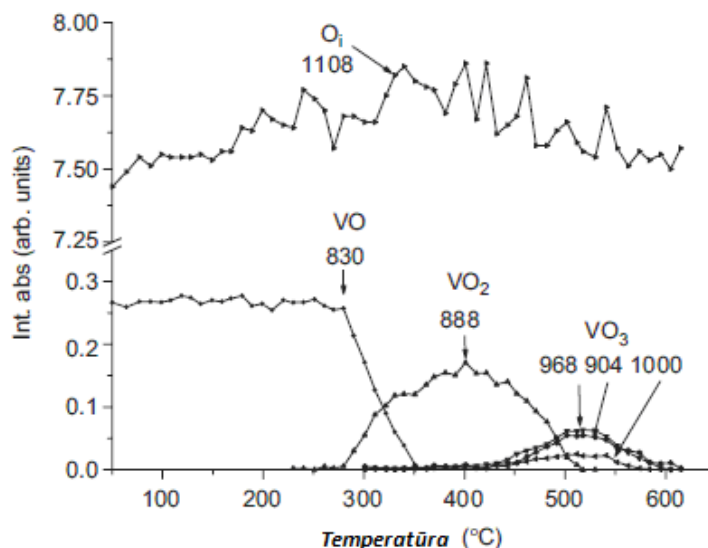
17 pav. Mažai Ge atomų turinčio Cz – Si kristalo IR absorbcijos spektrų fragmentai [36]



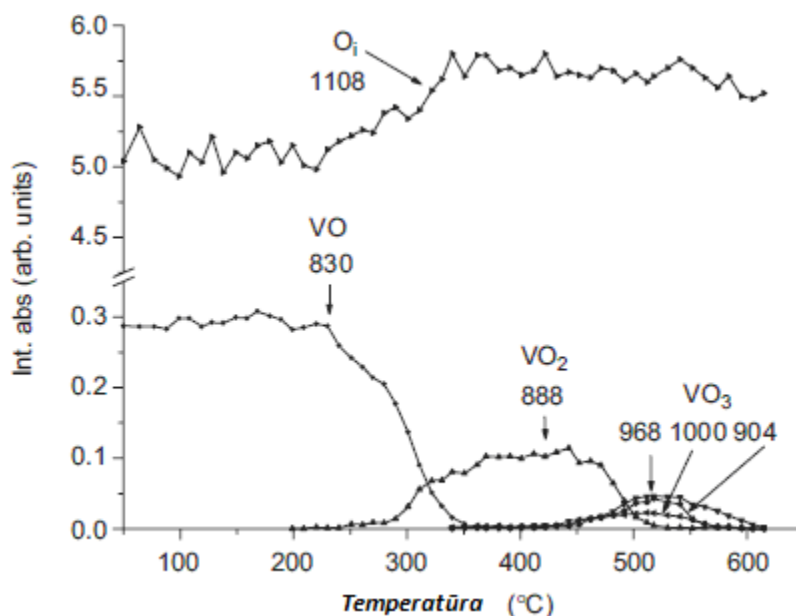
18 pav. Daug Ge atomų turinčio Cz – Si kristalo IR absorbcijos spektrų fragmentai [36]

A – centrai ar VO kompleksai gali būti atkaitinami ir KT, jeigu juose yra įterptas didelis Ge atomų kiekis. 2 MeV elektronais apšvitintų (ypač didelėmis dozėmis) Cz – Si mėginių tyrinėjimai rodo, kad vykstant $VO + O_i \rightarrow VO_2$ reakcijai, šalia vyksta ir kitas reiškinys – VO defektai dalyvauja reakcijose (atkaitinimo metu) su tarpmazginiu siliciu: $VO + Si_I \rightarrow O_i$.

Kaip matyti iš paveikslų (19, 20 pav.), VO₂ defektų koncentracija labai daug skiriasi, priklausomai nuo Ge koncentracijos Cz – Si kristale. Tai reiškia, kad VO kompleksų virtimas į VO₂ defektus labai priklauso nuo Ge.



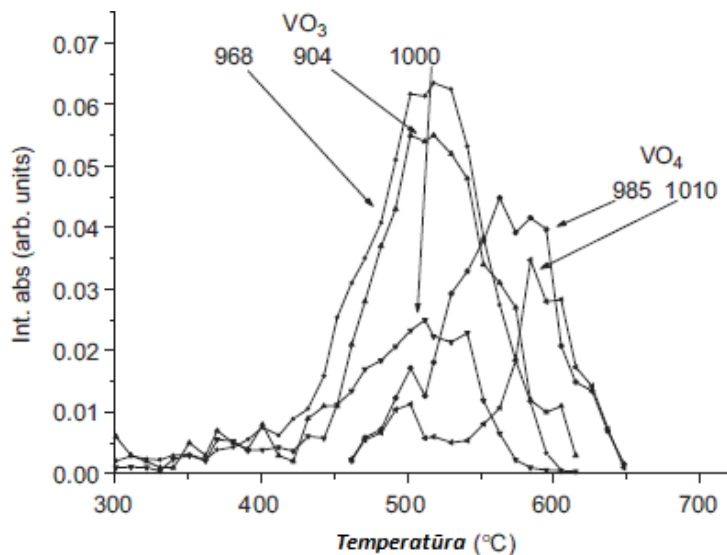
19 pav. Terminė VO (830 cm⁻¹), VO₂ (888 cm⁻¹), VO₃ (904, 968, 1000 cm⁻¹) IR linijų evoliucija, esant mažam Ge kiekiui, apšvitinant greitais elektronais ir po to atkaitinant [36]



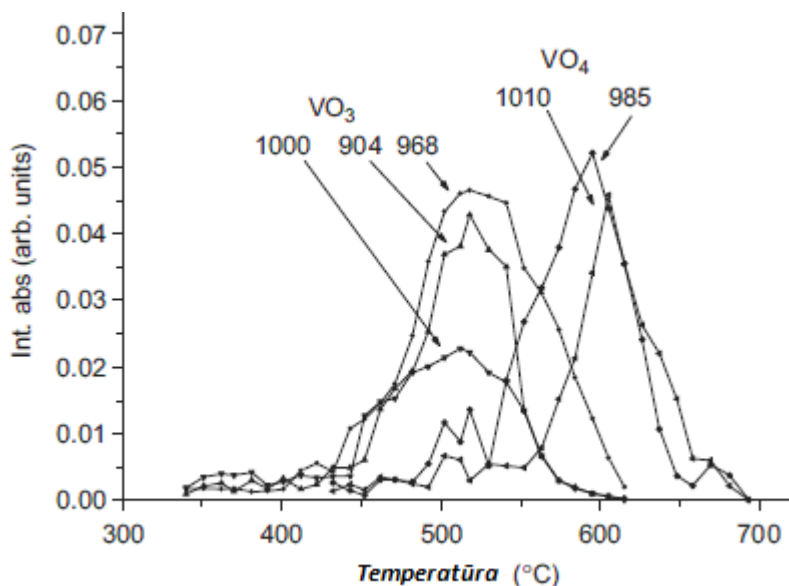
20 pav. Terminė VO (830 cm⁻¹), VO₂ (888 cm⁻¹), VO₃ (904, 968, 1000 cm⁻¹) IR linijų evoliucija, esant dideliame Ge kiekiui, apšvitinant greitais elektronais ir po to atkaitinant [36]

Įdomu tai, kad abiejuose mėginėliuose VO₂ augimas vyksta maždaug 290 °C temperatūroje pagal VO + O_i → VO₂ reakciją. Tuo tarpu atkaitinimo reakcija VO + Si_I → O_i yra aktyvuojama

truputį žemesnėse temperatūrose – 220 °C. Kaip pasekmė, vyksta $\text{VO}_2 + \text{O}_i \rightarrow \text{VO}_3$, $\text{VO}_3 + \text{O}_i \rightarrow \text{VO}_4$ defektų atsiradimo reakcijos. Paveikslai (21, 22) rodo VO_3 ir VO_4 kompleksų evoliuciją silicio kristaluose, turinčiuose Ge atomų.



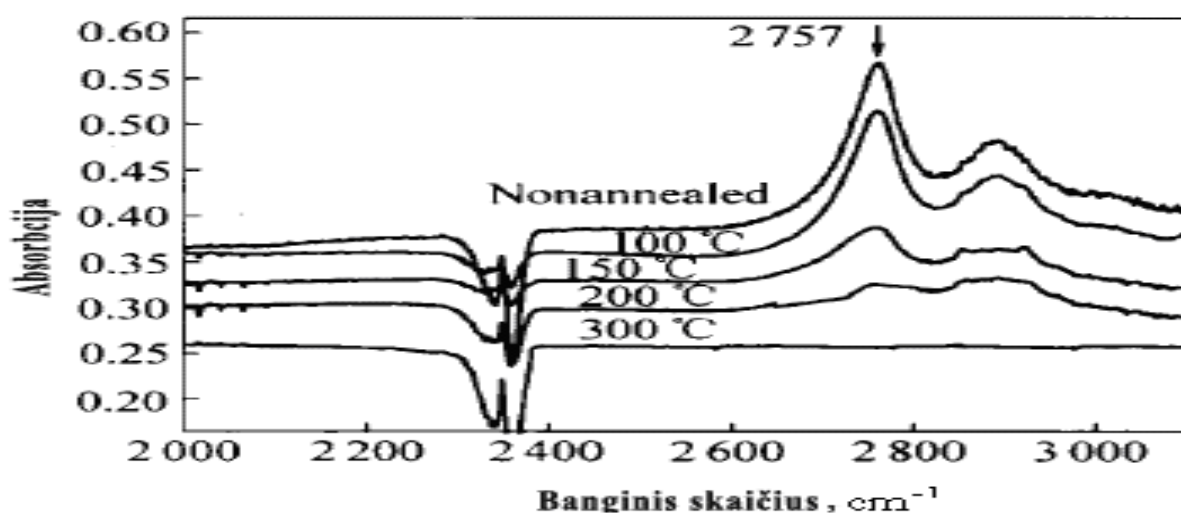
21 pav. Terminė VO_3 (904, 968, 1000 cm^{-1}) ir VO_4 (985 ir 1010 cm^{-1}) IR linijų evoliucija, esant mažam Ge kiekiui, apšvitinant greitais elektronais ir po to atkaitinant [36]



22 pav. Terminė VO_3 (904, 968, 1000 cm^{-1}) ir VO_4 (985 ir 1010 cm^{-1}) IR linijų evoliucija, esant dideliame Ge kiekiui, apšvitinant greitais elektronais ir po to atkaitinant [36]

Aiškliai matyti, kad VO_3 virtimas į VO_4 kompleksus vyksta ties $500\text{ }^\circ\text{C}$ temperatūra, kai yra didelis Ge atomų kiekis silicio kristale. Esant tokioms temperatūroms deguonies priemaišiniai atomai silicyje greitai difunduoja, taigi formuojasi VO_4 [37]. Galima daryti išvadą, kad deguonies atomų pagavimas kristalo reakcijose turėtų augti drauge su augančia Ge atomų koncentracija kristale.

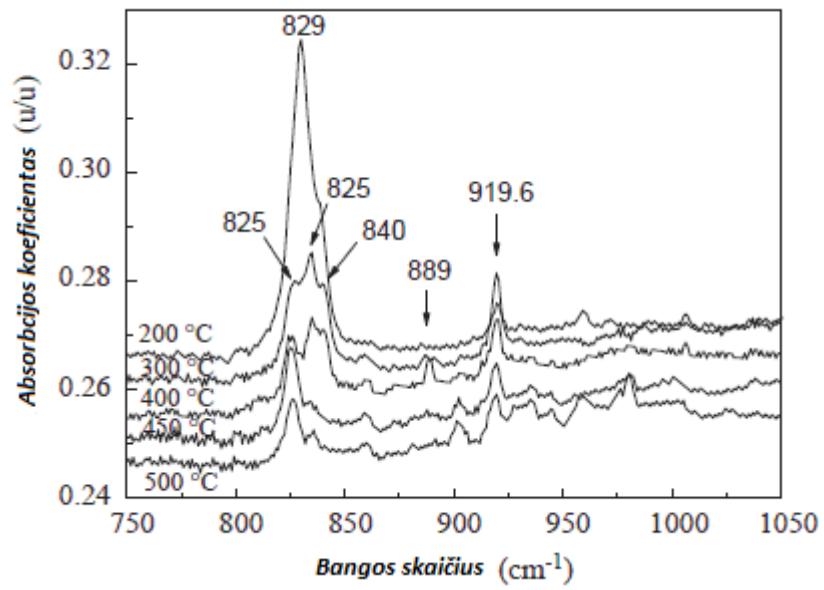
Yra ir kitokių kompleksų – V_nO_m , kurie formuojasi apšvitinus ir atkaitinus iki tam tikros temperatūros. Kaip žinoma, apšvitinus Cz – Si formuojasi VO kompleksas, dar vadinamas A – centru. Pagal tai matyti, jog deguonies atomas užima vakansijos vietą. Esant terminiam atkaitinimui, defektai formuojasi į V_nO_m , sudarytus iš vakansijų ir deguonies atomų. Anot šaltinių [24], V_2O_2 ir V_3O_2 kompleksų vaidmuo deguonies nusodinimo procese turi nemažai įtakos. Tai galima pamatyti 23 paveiksle.



23 pav. Divakansijų absorbcijos spektras, padarytas esant 10 K temperatūrai, kurios buvo atkaitintos $100 - 300\text{ }^\circ\text{C}$ temperatūroje [24]

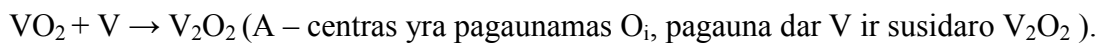
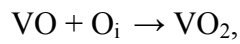
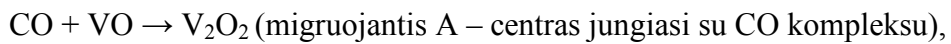
Buvo rasta, kad V_2 ėmė nykti esant $150\text{ }^\circ\text{C}$ temperatūrai ir tuomet visiškai atkaitintos buvo $300\text{ }^\circ\text{C}$ temperatūroje. Tai buvo 840 cm^{-1} linijos augimo pasekmė. Taigi daroma išvada, kad šios linijos augimas yra susijęs su V_2 nykimo procesu: $\text{V}_2 + \text{O}_i \rightarrow \text{V}_2\text{O}$. Kai atkaitinimo temperatūra viršija $400\text{ }^\circ\text{C}$, yra stebima gerai žinoma V_2O linija (889 cm^{-1}).

Po atkaitinimo, esant $400 - 450\text{ }^\circ\text{C}$ temperatūrai, ima ryškėti IR absorbcijos linijos: 834 cm^{-1} (V_3O_2), 889 cm^{-1} (VO_2), 825 cm^{-1} (V_2O_2). Tai matyti 24 paveiksle.



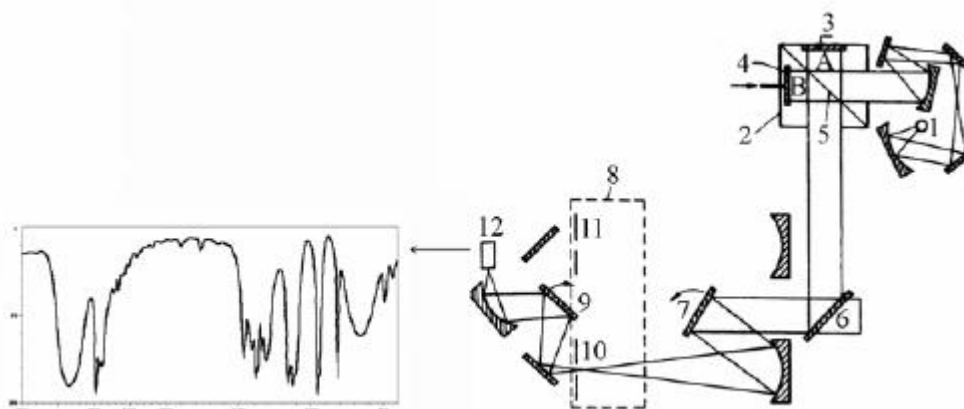
24 pav. Si kristalų, atkaitintų 200 – 500 °C temperatūroje, FT – IR spektras [24]

Vyksta tokios reakcijos:



3. Furje transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopija (FT – IR metodas)

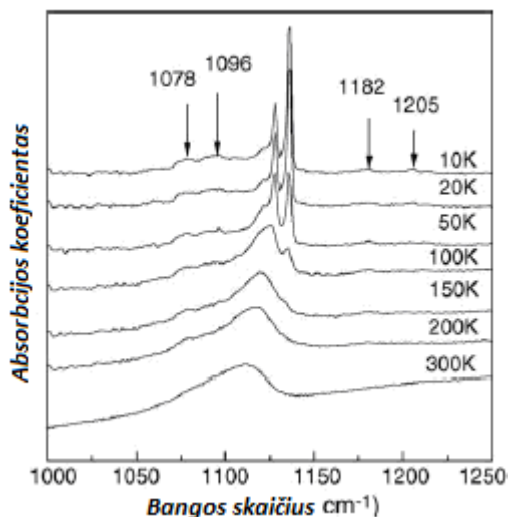
Infraraudonųjų spindulių spektroskopija (FT-IR) yra bene dažniausiai taikoma spektroskopijos technika, kurią labai plačiai naudoja organinės ir neorganinės chemijos specialistai. FT – IR – tai bekontaktė optinė perdavimo technika, naudojama smulkioms priemonėms silicio kristaluose atpažinti ir nustatyti jų kiekį. Šio eksperimento metu yra atliekamas skirtingų dažnių IR spindulių absorbcijos matavimas. Pagrindinė tokio eksperimento užduotis – nustatyto tiriamojo pavyzdžio chemines sudedamąsias grupes. IR spindulių spektras yra gaunamas nustatant perduodamo/absorbuojamo intensyvumo pokyčius. Dauguma komercinių instrumentų atskiria ir matuoja IR spinduliavimą, naudodami dispersinius spektrometrus ar Furje transformacijos spektrometrus [38]. Naudojantis įvairiais priedais, gali būti tyrinėjami ir tokie objektai kaip dujos, skysčiai. FT – IR spektrometrai naudoja Maikelsono interferometrą kaip IR spindulių šaltinį (25 pav.).



25 pav. FT – IR spektrometro schema. 1 – spinduliuotės šaltinis, 2 – Michelson'o interferometras, 3 - nejudantis veidrodis, 4 – skenuojantis veidrodis, 5 – spinduliuotės skaidytuvas, 6 – veidrodis, 7,9 - kintamos padėties veidrodžiai, 8 – bandinių kamera, 10 – palyginamasis bandinys, 11 – tiriamasis bandinys, 12 – detektorius [39]

Veidrodžio padėtis interferometre yra reguliuojama atgal ar į priekį nedideliu atstumu, kad būtų sukuriama interferograma pamatuotame šviesos perdavime per mėginio kamerą. Furje interferogramos pasikeitimas spektrui suteikia informacijos apie viską, kas tuo metu yra spindulio kelyje. Spektrai yra paverčiami į procentinį perdavimą, lyginant gautą spektrą su spindulio kelyje esančiu mėginiu su spektru, išgautu nesant mėginio kameroje.

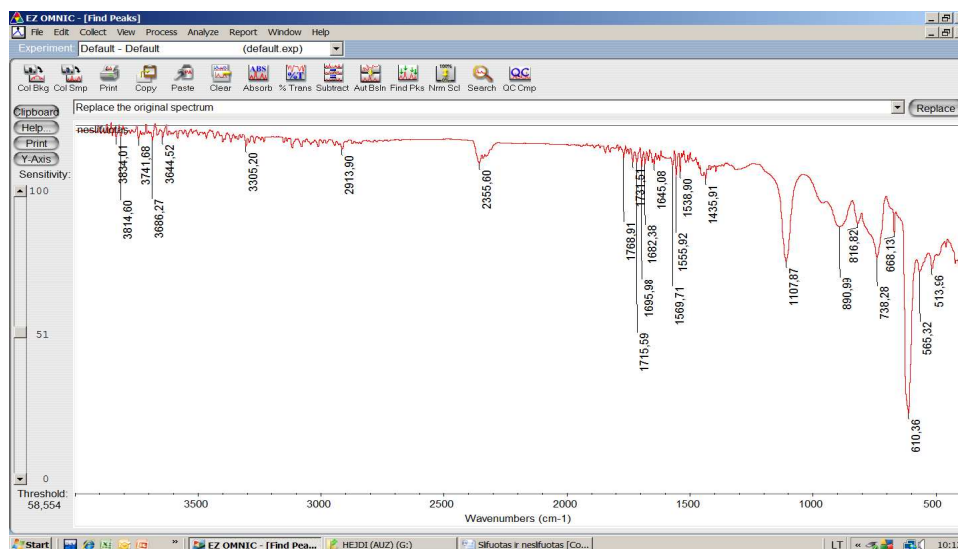
Kambario temperatūroje išmatutotų spektrų duomenys taip pat gali teikti informacijos apie deguonies priemaišas. 26 paveikslas rodo IR spindulių spektrus, išmatuotus KT, atkaitintų ir neatkaitintų pavyzdėlių. Tačiau atliekant matavimus KT, FT-IR negali pamatuoti labai artimų pikų.



26 pav. Absorbcijų spektrai, esant skirtingoms temperatūroms [40]

3.1. Kiekybinė analizė

Kaip žinoma, IR spinduliuotės bangų ilgiai yra 0.78 – 1000 μm . Tokių spindulių sugertis yra paprastai yra išreiškiama bangos ilgiu arba jos skaičiumi. Bangos skaičius (matuojamas cm^{-1}) parodo, kiek bangų yra tame ilgyje. Taip pat jis yra tiesiogiai proporcingas dažniui. IR spindulių sugerties informacija yra pateikiama tokio tipo grafikuose (27 pav.):



27 pav. Silicio monokristalo IR spindulių absorbcijos spektro pavyzdys

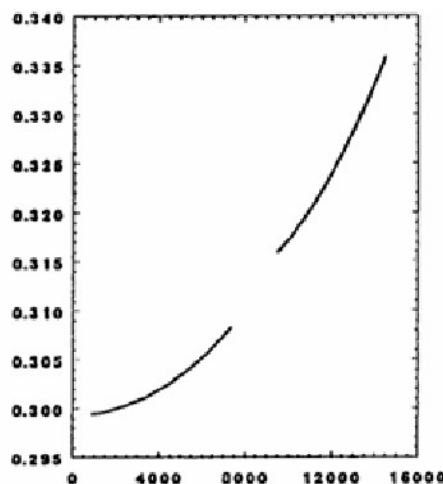
X ašyje nurodomas bangos ilgis/skaičius, Y ašyje – absorbcijos intensyvumas/pralaidumas procentais. Pralaidumas yra žymimas T raide ir yra susijęs su absorbcija (A), kuri apskaičiuojama pagal tokią formulę:

$$A = \log_{10} \left(\frac{1}{T} \right) = -\log_{10} T = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right), \quad (1)$$

kur I – išspinduliuotos energijos kiekis, perduotas medžiagai; I_0 – energijos kiekis, krintantis ant medžiagos.

3.1.1. Optinės silicio savybės. Atspindžio koeficientas

Silicis yra neskaidrus regimajame optiniame spektre, tačiau jis yra skaidrus IR spinduliams. Si lūžio rodiklis IR spektre yra $n=3.42$, atspindžio koeficientas yra ~ 0.3 .



28 pav. Lūžio rodiklio priklausomybės nuo bangos skaičiaus grafikas [2]

Atspindžio koeficientas yra apskaičiuojamas pagal tokią lygtį:

$$R = \frac{\left((n-1)^2 + k^2 \right)}{\left((n+1)^2 + k^2 \right)}, \quad (2)$$

kur k yra absorbcijos indeksas, priklausantis nuo bangos ilgio ($k = \alpha * \frac{\lambda}{4\pi}$, α – absorbcijos koeficientas, matuojamas cm^{-1}). Kaip žinoma, IR srityje k yra daug kartų mažesnis už n , todėl k galima atmesti. Tokiu atveju atspindžio koeficiento išraiška atrodo šitaip:

$$R = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2}. \quad (3)$$

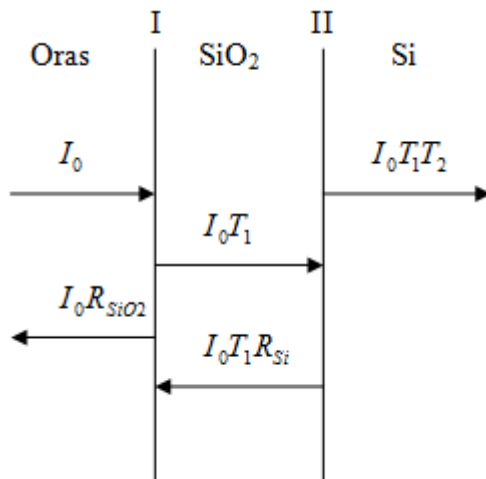
Kai bangos skaičius yra 400 – 5000 cm^{-1} intervale, silicio atspindžio koeficientas yra 0.3. Jis palaipsniui didėja iki 0.34, kai bangos skaičius pasiekia 15000 cm^{-1} (28 pav.).

3.1.2. Absorbcijos koeficientas

Norint apskaičiuoti plokštelės pralaidumą, naudojamosi tokia formulė:

$$N = \alpha * \sigma, \quad (4)$$

kur α – absorbcijos koeficientas, σ – kalibravimo faktorius. Tačiau dalis spindulių gali būti ne tik sugerti, bet ir atspindėti. Todėl pirmiausia reikėtų panagrinėti atspindį (29 pav.) nuo silicio kristalo, kuris yra padengtas silicio oksido (SiO_2) sluoksniu.



29 pav. IR spindulio eiga sandūroje su silicio plokštele

Tarkime, kad krintančių IR spindulių intensyvumas yra I_0 . Tada nuo I paviršiaus (riboje oras – SiO_2) atsispindės $I_0 R_{\text{SiO}_2}$, kur R_{SiO_2} randamas pagal formulę:

$$R_{\text{SiO}_2} = \left(\frac{n_{\text{SiO}_2} - 1}{n_{\text{SiO}_2} + 1} \right)^2, \quad (5)$$

laikant, kad SiO_2 lūžio rodiklis $n_{\text{SiO}_2} = 1.46$. Gaunama, kad $R_{\text{SiO}_2} = 0.035$. Daroma išvada, kad iki II paviršiaus sklinda $I_0 T_1$ intensyvumo spinduliai, kur T_1 yra SiO_2 pralaidumas, ($T_1 = 1 - R_{\text{SiO}_2}$). Nuo II paviršiaus (riboje $\text{SiO}_2 - \text{Si}$) atsispindės $I_0 T_1 R_{\text{Si}}$, kur R_{Si} randamas pagal formulę

$$R_{Si} = \left(\frac{n_{Si} - n_{SiO_2}}{n_{Si} + n_{SiO_2}} \right)^2, \quad (6)$$

laikant, kad Si lūžio rodiklis $n_{Si} = 3.42$. Gaunama, kad $R_{Si} = 0.161$. Dėl viršutinio silicio oksido sluoksnio pilnas atspindžio koeficientas yra apskaičiuojamas šitaip:

$$R_{pilas} = R_{Si} + R_{SiO_2} - R_{SiO_2} \cdot R_{Si}, \quad (7)$$

kur $n_{SiO_2} = 1.46$, o $n_{Si} = 3.42$ yra silicio oksido ir silicio lūžio rodikliai tiriamame bangų ruože [2].

Tokiu būdu sužinojus atspindžio koeficientą, apskaičiavus pralaidumą, galima nustatyti absorbcijos koeficientą α . Kaip žinoma, šviesos sugertis priklauso nuo krintančios bangos ilgio ir bandinio storio. Šį reiškinį aprašo Bugero dėsnis (8 formulė).

Žinant, kad pralaidumas yra lygus išėjusio spindulio intensyvumo ir krintančio į paviršių spindulio intensyvumo santykiui, tai α galima išsireikšti iš tokios formulės:

$$I = I_0 \cdot e^{-\alpha l}, \quad (8)$$

l – optinio kelio ilgis.

Panaudojus dešimtainį logaritmą, formulę galima perrašyti:

$$I = I_0 * 10^{-\epsilon N l}, \quad (9)$$

kur ϵ – ekstinkcijos koeficientas, N – medžiagos koncentracija.

Mėginio optinis tankis apskaičiuojamas tokia formule:

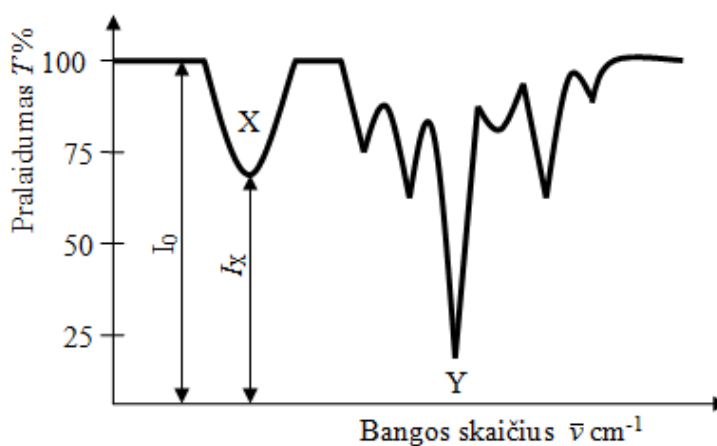
$$A = \epsilon * N * l. \quad (10)$$

3.2. Optinio tankio nustatymo būdai

Infraraudonajai spektrinei analizei būdingi tam tikri ypatumai. Kaip matyti iš formulės

$$A = \lg \frac{1}{T}, \quad (11)$$

optinis tankis yra lygus santykio I_0/I logaritmui. IR spektrinėje analizėje tiriamosios medžiagos spektras registruojamas $\bar{\nu} - I$ koordinatėse. Norint nustatyti optinį tankį, reikia žinoti krintančio elektromagnetinio srauto stiprį I_0 ir per tiriamąjį bandinį praėjusio srauto stiprį I . Jeigu maksimalus pralaidumas nėra bazinė linija (30 pav. sugerties juosta Y) arba analizuojamą spektro juostą užkloja kitos juostos, tai optinio tankio nustatyti nepavyks arba jis bus netikslus.

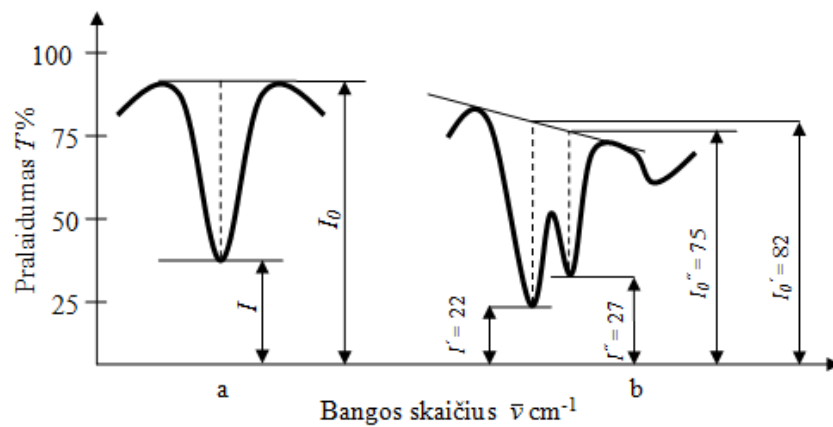


30 pav. Hipotetinis infraraudonasis spektras [41]

Tokiu atveju optinio tankio nustatymui naudojami kiti metodai – bazinės linijos ir santykinės absorbcijos matavimo metodas [41]. Naudojantis bazinės linijos metodu, yra brėžiama tiesė – bazinė linija (31 a pav.) per taškus, kurie atitinka tiriamo spektro foną, arba per taškus, kurių padėtis nepriklauso nuo koncentracijos. Jos atžvilgiu yra nustatoma I_0 vertė.

Tiriamos medžiagos koncentracija yra nustatoma gradavimo metodu. Yra paruošiami bandiniai, kurių tiriamos koncentracijos yra žinomos. Kiekvieno bandinio spektras yra užregistruojamas. Bazinės linijos metodu išmatavus I_0 ir I vertes, apskaičiavus optinį tankį A , iš gradavimo grafiko yra sužinomas tiriamos medžiagos kiekis bandinyje.

Jeigu dominanti absorbcijos juosta yra šalia kitos intensyvios juostos, tada naudojamas santykinės absorbcijos matavimo metodas (31 b pav.). Tokiu atveju yra imama I_0 vertė, atitinkanti pagrindinio komponento koncentraciją, kuri yra nustatoma gradavimo metodu.



31 pav. Bazinės linijos nustatymo pavyzdys [41]

4. Taškinių defektų, susijusių su deguonimi, tyrimas Si monokristale, panaudojant FT-IR spektroskopiją

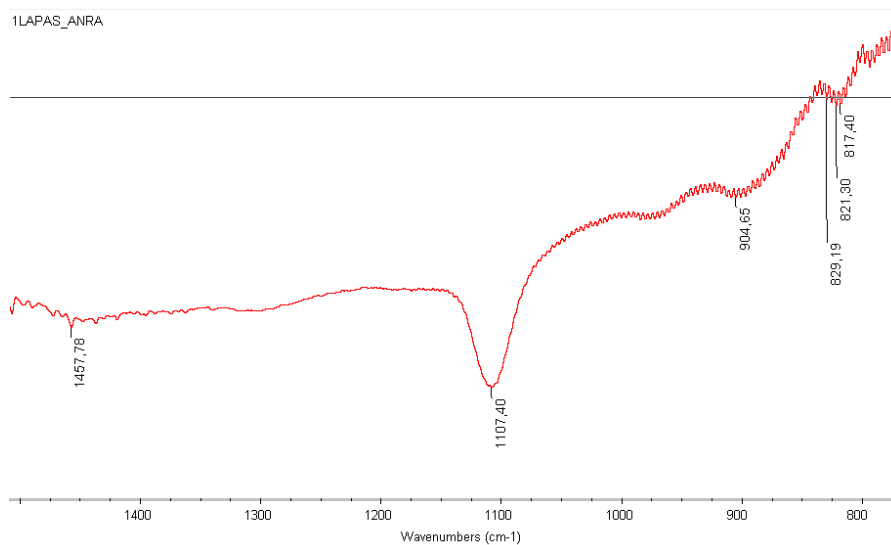
Eksperimento metu buvo naudojamas „PHYWE“ firmos Rentgeno spindulių difraktometras su keičiamais anodais (naudojami Cu). Imama maksimali anodinė įtampa (35 kV), o srovė – 1 mA (t.p. maksimali, siekiant išgauti maksimalų fotonų skaičių - $N \approx 10^9$ kvantų/cm²s). Atliekant eksperimentą, Si plokštelės buvo švitinamos Rentgeno spinduliais. Naudojami Cz – Si n – tipo bandiniai, kurių storis 0.06 cm. Švitinimas truko keturias valandas. Plokštelės tiriamos „Thermo Nicolet IR 100 FT – IR“ spektroskopu. Eksperimento metu buvo naudojama silicio plokštelė, padalinta į dvi lygias dalis. Viena dalis buvo tirama esant silicio oksido sluoksniui, kitos dalies paviršius buvo poliruojamas mechaniškai, naudojant šlifavimo pastą iki veidrodinio atspindžio paviršiaus.

Cz – Si mėginiuose buvo nustatinėjami taškinių defektų absorbcijos koeficientai po švitinimo abejoms plokštelės dalims. „EZ OMNIC“ programa buvo naudojama tiriamųjų mėginių spektro analizei.

4.1 Nešlifotos Si plokštelės tyrimo rezultatai

4.1.1 Nešlifotos, nešvitintos Si plokštelės tyrimas

Eksperimento metu buvo nustatinėjamas absorbcijos koeficientai ties keliomis smailėmis: 1108 cm⁻¹ (priklausančia tarpmazginiam deguoniui - O_i), 904 cm⁻¹ (VO₂) ir 821 cm⁻¹ (VO) (32 pav.).



32 pav. Taškinių defektų smailių padėtys (O_i – 1107 cm⁻¹, VO₂ – 904 cm⁻¹ ir VO – 821 cm⁻¹) IR spindulių pralaidumo spektre Si monokristale

Pirmiausia buvo nustatomas kritusio (I_0) ir pro bandinį praėjusio spindulio intensyvumas (I) anksčiau minėtose spektro padėtyse, po to apskaičiuojami pralaidumo (T) ir absorbcijos (α) koeficientai (1 lentelė). Skaičiavimai atlikti Mathcad programa (žr. priedą Nr. 1)

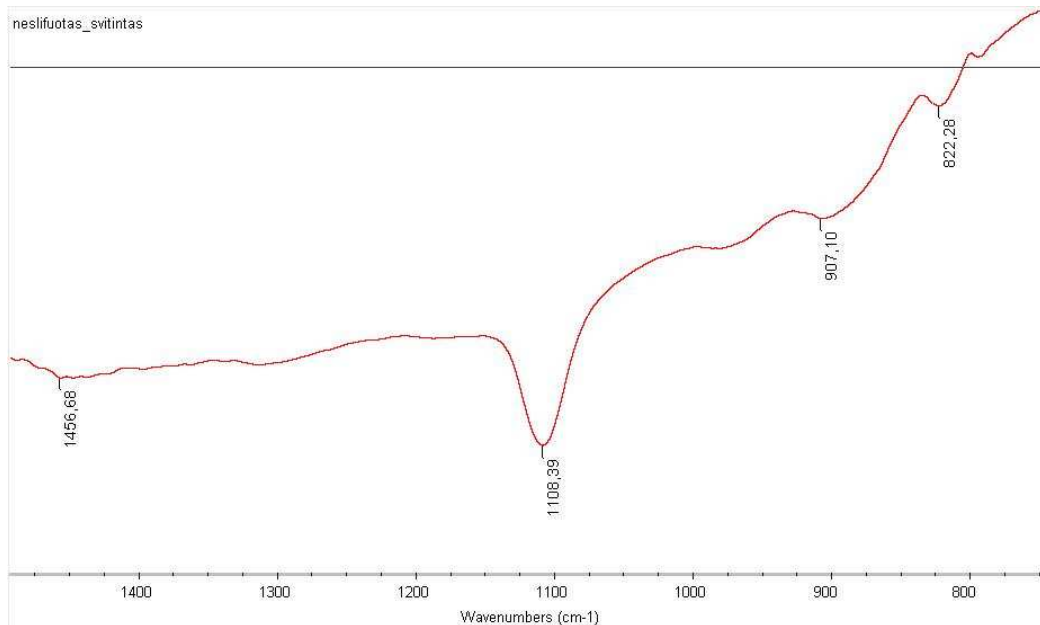
1 lentelė

Nešlifotos, nešvitintos Si plokštelės tyrimo duomenys

Taškinis defektas	I_0 (pradinis spindulio intensyvumas, %)	I (pro bandinį praėjusio spindulio intensyvumas, %)	T (pralaidumo koeficientas)	α (absorbcijos koeficientas, cm^{-1})
1107 cm^{-1} (O_i)	18.280	16.451	0.900	1.757
904 cm^{-1} (VO_2)	19.734	19.569	0.992	0.140
821 cm^{-1} (VO)	21.347	21.082	0.988	0.208

4.1.2 Nešlifotos, švitintos Si plokštelės tyrimas

Atliekama ta pati procedūra kaip ir anksčiau, tik mėginys yra tiriamas po 4 valandų švitinimo (33 pav.). Duomenys pateikiami antroje lentelėje.



33 pav. Taškinių defektų ($\text{O}_i - 1108 \text{ cm}^{-1}$, $\text{VO}_2 - 907 \text{ cm}^{-1}$ ir $\text{VO} - 822 \text{ cm}^{-1}$) smailių padėtys IR spindulių pralaidumo spektre Si monokristale

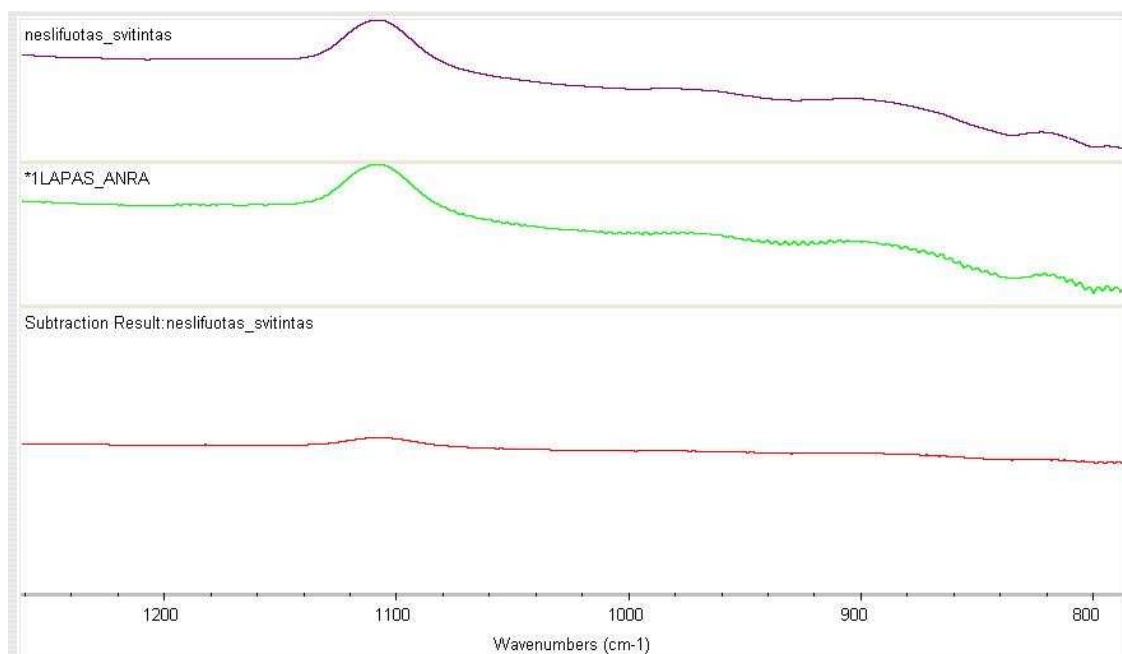
Nešlifotos, švitintos Si plokštelės tyrimo duomenys

Taškinis defektas	I_0 (pradinis spindulio intensyvumas, %)	I (pro bandinį praėjusio spindulio intensyvumas, %)	T (pralaidumo koeficientas)	α (absorbcijos koeficientas, cm^{-1})
$1108 \text{ cm}^{-1} (\text{O}_i)$	18.778	16.792	0.894	1.863
$907 \text{ cm}^{-1} (\text{VO}_2)$	20.447	20.151	0.986	0.243
$822 \text{ cm}^{-1} (\text{VO})$	22.204	21.821	0.983	0.290

Skaičiavimai pateikti priede Nr. 2.

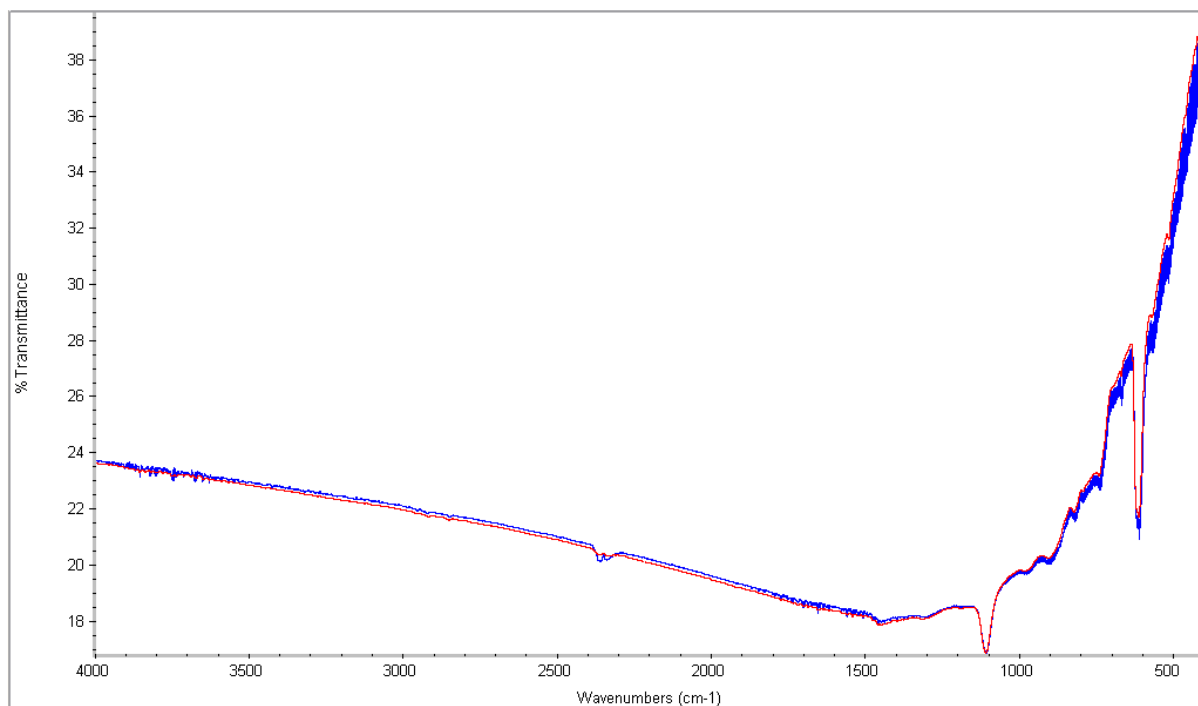
4.1.3 Nešlifotų Si plokštelių tyrimo rezultatų palyginimas

Gautus grafikus galima tarpusavyje palyginti dviem būdais: skirtuminiu grafiku (34 pav.) – iš nešlifoto, švitinto mėginio absorbcijos spektro (viršutinė kreivė) yra „atimamas“ nešlifoto, nešvitinto bandinio absorbcijos spektras (vidurinė kreivė). Iš jo matyti, kad po švitinimo smailės truputį „paaugo“ – yra nežymūs iškilimai spektre (apatinė kreivė).

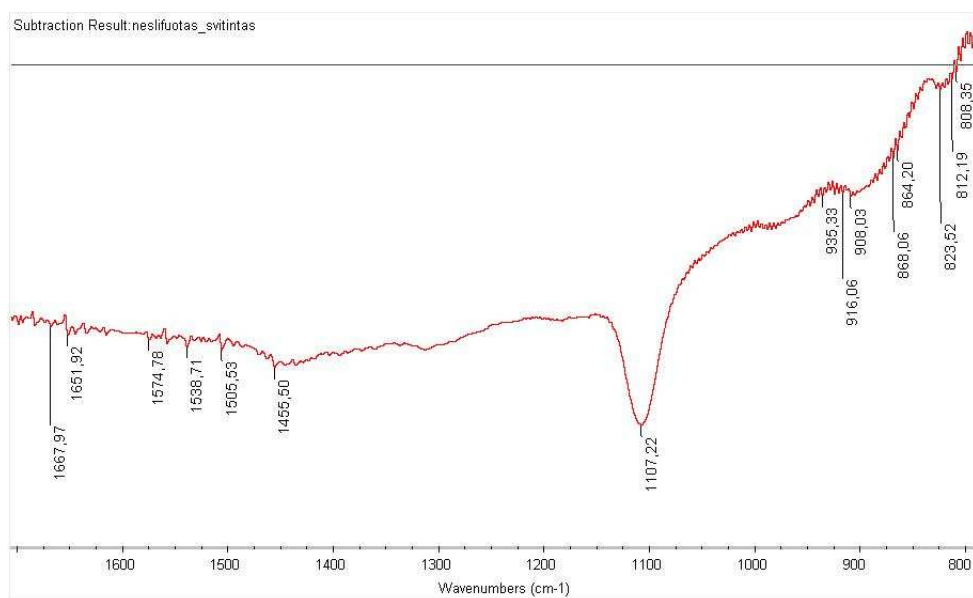


34 pav. Nešlifotos, nešvitintos (žalia kreivė) ir nešlifotos, švitintos (violetinė kreivė) Si plokštelės absorbcijų spektrai ir jų skirtumas (raudona kreivė)

Kitas būdas yra abu grafikus stebėti viename lange (pav. 35). Raudona spalva žymi nešlifoto, nešvitinto mėginio pralaidumo spektrą, mėlyna – nešlifoto, švitinto mėginio.



35 pav. Nešlifotos, nešvitintos Si plokštelės (raudona linija) ir nešlifotos, švitintos Si plokštelės (mėlyna linija) IR spindulių pralaidumo spektrai



36 pav. Nešlifotos, nešvitintos Si plokštelės ir nešlifotos, švitintos Si plokštelės optinių tankių skirtumas

Iš gautų rezultatų matyti, kad po švitinimo (kai plokštelės nėra nušlifotos) absorbcijų koeficientai padidėjo ties minėtomis smailėmis.

Buvo apskaičiuotas absorbcijos koeficientų santykinis pokytis (išreikštas procentais) – kaip jis pasikeitė kiekvienam taškiniam defektui po švitinimo (žr. priedą Nr. 5). 3 lentelėje pateikiami

eksperimento rezultatai, iš kurių matyti, kad absorbcijos koeficientų pokyčiai yra teigiami. Vadinas, šių defektų koncentracija po švitinimo Rentgeno spinduliais padidėjo.

3 lentelė

Absorbcijų koeficientų palyginimas nešlifuotiems mėginiams prieš švitinimą ir po jo

Taškinis defektas	Absorbcijos koeficientas prieš švitinimą, cm^{-1}	Absorbcijos koeficientas po švitinimo, cm^{-1}	Absorbcijos koeficiento pokytis, %
O_i	1.757	1.863	5.69
VO_2	0.14	0.413	42.38
VO	0.208	0.290	28.27

4.2. Šlifuočių Si plokštelių tyrimo rezultatai

4.2.1 Šlifotos, nešvitintos Si plokštelės tyrimas

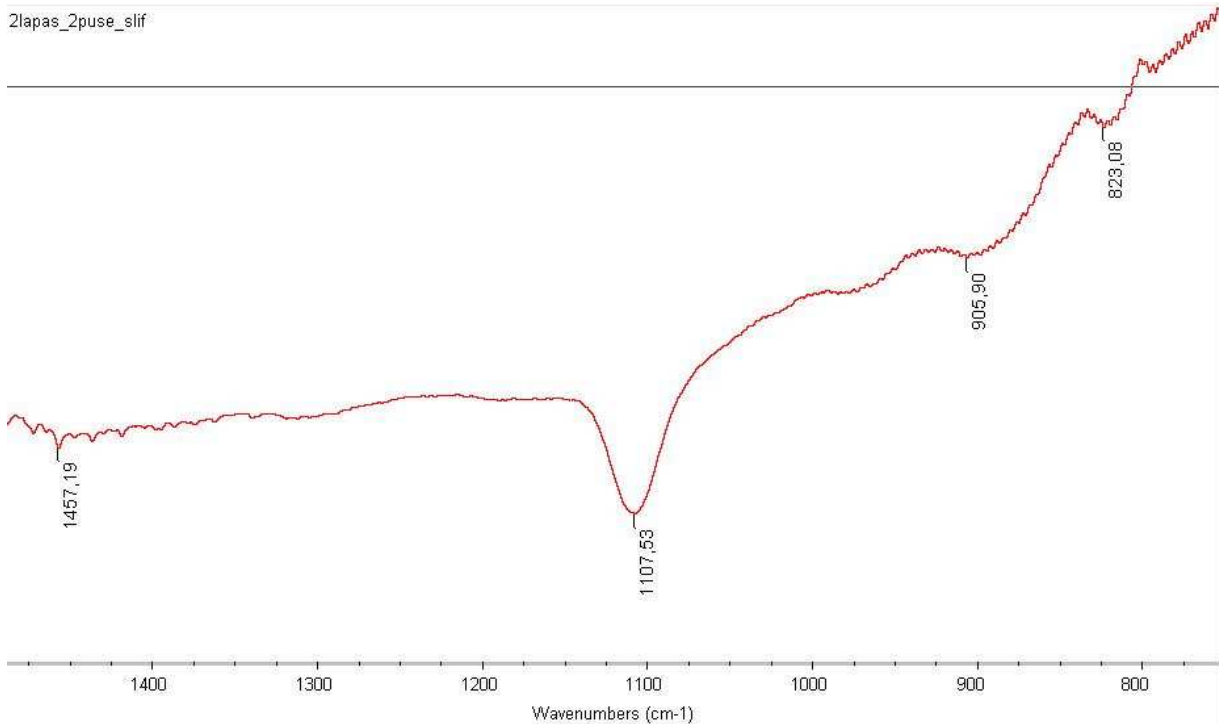
Atliekama ta pati procedūra su kita plokštelės dalimi, kuriai mechaniškai buvo pašalintas silicio oksido sluoksnis.

4 lentelė

Šlifotos, nešvitintos Si plokštelės tyrimo duomenys

Taškinis defektas	I_0 (pradinis spindulio intensyvumas, %)	I (pro bandinį praėjusio spindulio intensyvumas, %)	T (pralaidumo koeficientas)	α (absorbcijos koeficientas, cm^{-1})
$1107 \text{ cm}^{-1} (\text{O}_i)$	17.620	15.652	0.888	1.974
$905 \text{ cm}^{-1} (\text{VO}_2)$	19.072	18.999	0.996	0.064
$823 \text{ cm}^{-1} (\text{VO})$	20.799	20.681	0.994	0.095

Skaičiavimai pateikti priede Nr. 3.



37 pav. Taškinių defektų smalių padėtys ($O_i - 1108 \text{ cm}^{-1}$, $VO_2 - 905 \text{ cm}^{-1}$, $VO - 823 \text{ cm}^{-1}$) IR spindulių pralaidumo spektre Si monokristale

4.2.2 Šlifotos, švitintos Si plokštelės tyrimas

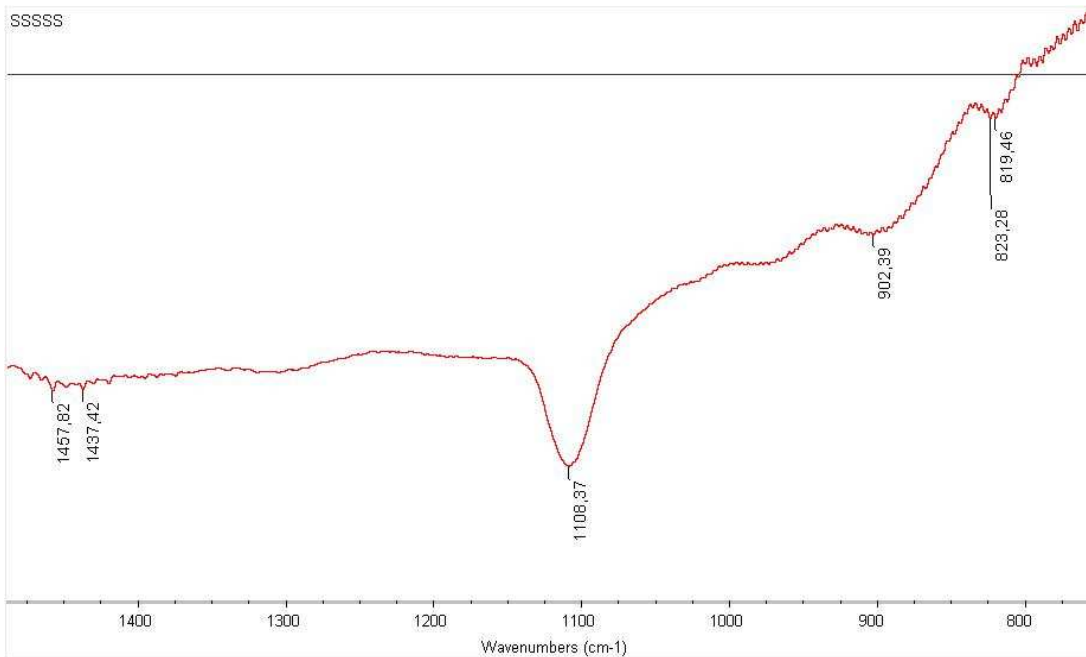
Atliekami tie patys veiksmai su plokštele (be silicio oksido sluoksnio), kuri buvo švitinama 4 valandas.

5 lentelė

Šlifotos, švitintos Si plokštelės tyrimo duomenys

Taškinis defektas	I_0 (pradinis spindulio intensyvumas, %)	I (pro bandinį praėjusio spindulio intensyvumas, %)	T (pralaidumo koeficientas)	α (absorbcijos koeficientas, cm^{-1})
$1108 \text{ cm}^{-1} (O_i)$	17.009	15.249	0.897	1.820
$902 \text{ cm}^{-1} (VO_2)$	18.409	18.362	0.997	0.043
$823 \text{ cm}^{-1} (VO)$	20.033	19.921	0.994	0.093

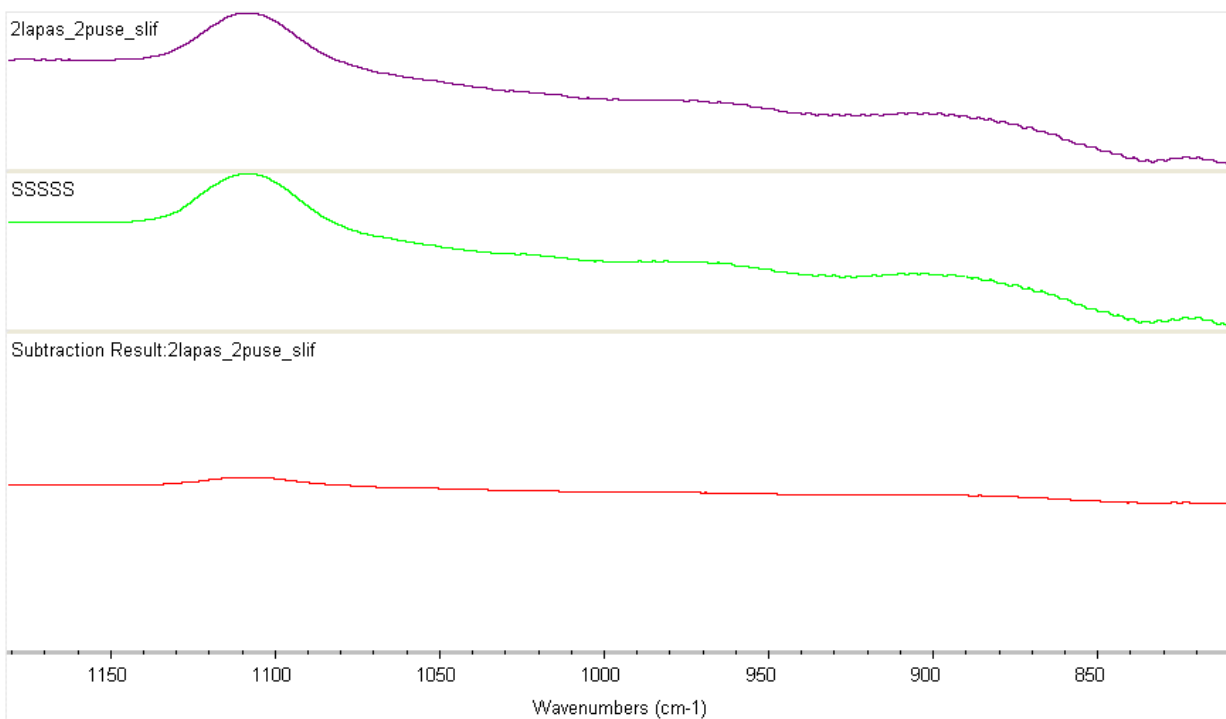
Skaičiavimai pateikti priede Nr. 4.



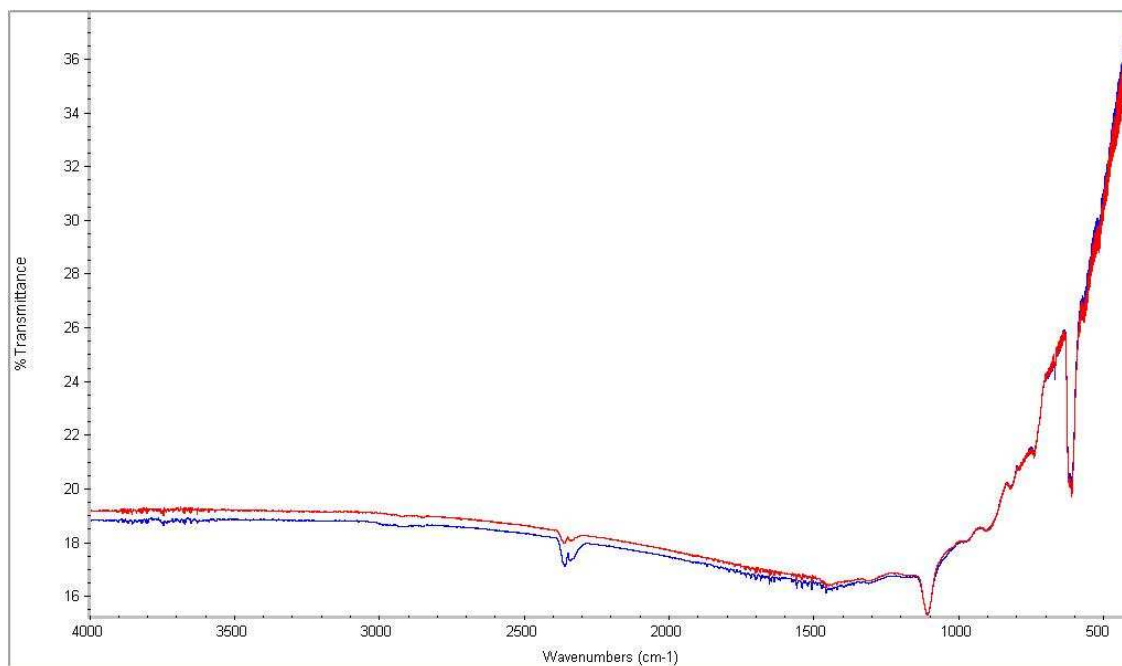
38 pav. Taškinių defektų smailių padėtys ($O_i - 1108\text{ cm}^{-1}$, $VO_2 - 902\text{ cm}^{-1}$, $VO - 823\text{ cm}^{-1}$) IR spindulių pralaidumo spektre Si monokristale

4.2.3 Šlifuotų mėginių tyrimo rezultatų palyginimas

Iš šlifuoto, nešvitinto mėginio (39 pav.) absorbcijos spektro (viršutinė kreivė) yra „atimamas“ šlifuoto, švitinto mėginio absorbcijos spektras (vidurinė kreivė). Matyti, kad po švitinimo smailės „sumažėjo“.



39 pav. Šlifuotų Si plokštelių absorbcijų spektrai ir jų skirtumas



40 pav. Šlifotos, nešvitintos Si plokštelės (mėlyna linija) ir šlifotos, švitintos Si plokštelės (raudona linija) IR spindulių pralaidumo spektrai

Iš gautų rezultatų matyti (6 lentelė), kad po švitinimo (kai bandiniai yra nušlifuoti) absorbcijų koeficientai sumažėjo ties minėtomis smailėmis. Vadinasi, nagrinėjamų taškinių defektų koncentracija plokštelėje sumažėjo.

6 lentelė

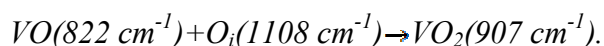
Absorbcijų koeficientų palyginimas šlifuotiems mėginiams prieš švitinimą ir po jo

Taškinis defektas	Absorbcijos koeficientas prieš švitinimą, cm^{-1}	Absorbcijos koeficientas po švitinimo, cm^{-1}	Absorbcijos koeficiento pokytis, %
O_i	1.974	1.820	- 8.46
VO_2	0.064	0.043	- 48.83
VO	0.095	0.093	- 2.15

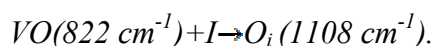
Skaičiavimai pateikti priede Nr. 6.

4.3. Defektų reakcijos

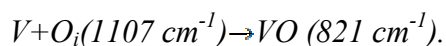
Iš 33 paveikslo matyti, kad nešlifuoatame, švintintame bandinyje absorbcija sustiprėja ties 907 cm^{-1} . Tikėtina, kad ši linija yra susijusi su kompleksu VO_2 . Kadangi iš 36 paveikslo matyti, jog optinis tankis ties 822 cm^{-1} sumažėja, tai reiškia, kad sumažėja VO koncentracija. Todėl manoma, jog galima tokia defektų reakcija:



Kita vertus, optinio tankio sumažėjimą ties 822 cm^{-1} 36 paveiksle, galima susieti ir su tokia reakcija:



Vykstant tokiai reakcijai, tarpmazginio deguonies koncentracija turėtų didėti. Pats kompleksas VO atsiranda vykstant reakcijai:



Tokių kompleksų atsiradimas Si kristale prisotintame deguonies yra labai tikėtinas, kadangi Rentgeno spinduliais paviršiuje sukurtos vakansijos, kaip žinoma yra jautresios kambario temperatūroje.

Išvados

Darbo metu buvo atlikta išsami mokslinės literatūros analizė, susipažinta su defektais ir jų kompleksais kristaluose, radiacinių defektų kūrimo mechanizmais.

Pagrindinis dėmesys atliekant darbą buvo skiriamas taškiniams defektams Si monokristale, susijusiems su deguonimi. Anot apžvelgtos literatūros autorių, vieni pagrindinių defektų yra šie: O_i (1108 cm^{-1}), VO_2 (902 cm^{-1}), VO (822 cm^{-1}).

Palyginus šių taškinių defektų Si monokristale absorbcijos koeficientus dviem atvejais – kai silicio oksido sluoksnis nepašalintas ir pašalintas, matyti tokie skirtumai:

- Kai bandinys yra nešlifluotas, po švitinimo Rentgeno spinduliais taškinių defektų koncentracija bandinyje padidėja: $\alpha(O_i) \uparrow 5.69\%$, $\alpha(VO_2) \uparrow 42.38\%$, $\alpha(VO) \uparrow 28.27\%$.
- Kai bandinys yra nušlifluotas, po švitinimo Rentgeno spinduliais taškinių defektų koncentracija bandinyje sumažėja: $\alpha(O_i) \downarrow 8.46\%$, $\alpha(VO_2) \downarrow 48.83\%$, $\alpha(VO) \downarrow 2.15\%$.

Tokiu atveju galima daryti išvadą, kad bandiniui esant su oksido sluoksniu, vyksta deguonies atomų difuzija į Si monokristalo vidų. Pasitvirtina prieš eksperimentą iškelta hipotezė.

Literatūros sąrašas:

1. Algirdas Mekys. Daktaro disertacija. Medžiagų, taikomų jonizuojančiojo spinduliuotės detektorių gamyboje, defektai ir jų reakcijos. Vilniaus universitetas, 2008 m.;
2. O'mara, W.C.; Herring, R.B.; Hunt L.P. *Handbook of semiconductor silicon technology*. 1990. ISBN: 0-8155-1237-6.
3. Кашкаров П. К. (1999). Образование точечных дефектов в полупроводниковых кристаллах. Физика, Nr. 1. Москва: Наука.
4. http://chemlinks.beloit.edu/edetc/SlideShow/slides/defects/Schottky_Frenkel.html [Prieiga per internetą. Žiūrėta 2011 – 03 – 20]
5. Štaras S. Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai . Vilnius, 2005 m. 282 – 285 p.
6. Watkins G. D. (2000). Intrinsic defects in silicon. *Materials Science in Semiconductor Processing* 3 Phys. Rev. Lett. 42. p.227-235.
7. Lindström J. L., Murin L. I., Hallberg T., Markevich V. P., Svensson B. G., Kleverman M., Hermansson J., (2002) Defect engineering in Czochralski silicon by electron irradiation at different temperatures. *Physica B* 186, 121 - 125.
8. Вавилов В. С., Кив А.Е., Ниязова О. Р. (1990). Дефекты в кремнии и на его поверхности Москва: Наука
9. Корбетт Дж., Бургуэн Ж.. (1979). Точечные дефекты в полупроводниках / Под ред. Б. И. Болтакса, Машовец, А. Н. Орлова. Москва.: Мир.
10. Мукашев Б. Н., Абдуллин Х. А., Горелкинский Ю. В. (2002). Метастабильные и бистабильные дефекты в кремнии Успехи физических наук. Том 170, No. 2.
11. Shuai Yang, Yangxian Li, Qianoyun Ma, Lili Liu, Xuewen Xu, Pingjuan Niu, Yongzhang Li, Shengli Niu, Hongtao Li, (2005) Infrared absorption spectrum studies of the VO defect in fast-neutron-irradiated Czochralski silicon. *Journal of Crystal Growth* 280, 60 – 65.
12. Lindström J. L., Murin L. I., Markevich V. P., Hallberg T., Svensson B. G., (1999) Vibrational absorption from vacancy-oxygen-related complexes (VO, V₂O, VO₂) in irradiated silicon. *Physica B* 273-274, 291-295.
13. G. Davies, R.C. Newman, in: S. Mahajan (Ed.), *Handbook on Semiconductors*, Vol. 3, North-Holland, Amsterdam, 1994, p. 1557.
14. Watkins G. D. (2000). Intrinsic defects in silicon. *Materials Science in Semiconductor Processing* 3 Phys. Rev. Lett. 42. p.227-235.
15. G. D. Watkins, J.W. Corbett, Phys. Rev. 134 (1964) A1359.
16. A.N. Larsen, A. Mesli, Physica B 401 – 402 (2007) 85.

17. H. av Skardi, A. Bro Hansen, A. Mesli, A.N. Larsen. Nucl. Instr. Meth. B 186 (2002) 195.
18. A. Chroneos, H. Bracht, C. Jiang, B.P. Uberuaga, R.W. Grimes, Phys. Rev. B 78 (2008) 195201.
19. C.P. Ewels, R. Jones, S. Oberg, Mater. Sci. Forum 196 – 201 (1995) 969.
20. D.J. Backlund, S.K. Estreicher (2007). Theoretical study of the C_iO_i and $I_{Si}C_iO_i$ defects in Si. Physica B 401 163 – 166.
21. Backlund D. J., Estreicher S. K. (2007). Theoretical study of the C_iO_i and $I_{Si}C_iO_i$ defects in Si. Physica B, 401–402; 163–166.
22. Chirunenکو L. I, Pomozov Yu, Tripachko N. (2005). Interstitial Carbon Related Defects in Low-Temperature Irradiated Si: FTIR and DLTS Studies. Diffusion and Defect Data Part B. p 108-109, p. 261-266.
23. C.A. Londos, M.S. Potsidi, E.Stakakis. Carbon-related complexes in neutron-irradiated silicon. *Physica B* 340–342 (2003) 551–555
24. Yang S., Li Y., Ma Q., Heyan Liu H., Hao Q., Li Y., Niu S., Li H. (2005). Infrared absorption spectrum studies of the VO defect in fast-neutron-irradiated Czochralski silicon. Journal of Crystal Growth 280, 60–65.
25. Гриценко М. И., Кобзар О. О., Помозов Ю. В., Соснин М. Г., Хируненко Л. И. (2010). Эффективность взаимодействия межузельного углерода с кислородам, оловом и углеродом замещения в облученном кремнии. Український фізичний журнал. Т. 55, №2
26. Chen Gui-feng, Li Yang-xian, Liu Li-li, Niu Ping-juan, Niu Sheng-li, Chen Dong - feng. (2006). Annealing behaviors of vacancy in varied neutron irradiated Czochralski silicon. Trans. Nonferrous Met. SOC.China 16, p.113-115.
27. Ma Q., Li Y., Yang S., Liu H., Hao Q. (2005). Infrared studies of the oxygen precipitation in fast neutron irradiated CZ – Si. Materials Science and Engineering B 122, 218–221.
28. Khirunenکو L. I, Murin L. I., Lindstr J. L., Sosnin M. G., Pomozov Yu.V. (2001). Self-interstitial-oxygen related defects in low-temperature irradiated Si. Physica B 308–310; 458–461.
29. C.A. Londos, M.S. Potsidi, G.D. Antonaras, A. Andrianakis. Isochronal annealing studies of carbon-related defects in irradiated Si. *Physica B* 376–377 (2006) 165–168
30. J. Hermansson, L.I. Murin, T. Hallberg, V.P. Markevich, J.L. Lindstrom, M. Kleverman, B.G. Svensson. Complexes of the self-interstitial with oxygen in irradiated silicon: a new assignment of the 936 cm^{-1} band. Physica B 302 – 303 (2001) 188 – 192.

31. J.L. Lindstrom, T. Hallberg, J. Hermansson, L.I. Murin, B.A. Komarov, V.P. Markevich, M. Kleverman, B.G. Svensson (2001). Interaction between self-interstitials and the oxygen dimer in silicon. *Physica B* 308 – 310, 284 – 289.
32. T. Hallber, et al., *Mater. Sci. Forum* 258 – 263 (1997) 361.
33. S. E. Donnelly, V.M. Vishnyakov, R.C. Birtcher, G. Carter, *Nucl. Instrum. Meth. B* 175 – 177 (2001) 132.
34. Lindström J. L., Murin L. I., Svensson B. G., Markevich V. P., Hallberg T., (2003) The VO₂* defect in silicon. *Physica B* 340-342, 509–513.
35. Shuai Yang, Yangxian Li, Qiaoyun Ma, Heyan Liu, Qiuyan Hao, Yongzhang Li, Shengli Niu, Hongtao Li (2005). Positron annihilation spectroscopy studies of fast neutron irradiated Czochralski silicon. *Journal of Crystal Growth* 276 43 – 47.
36. Londos C.A., Andrianakis A., Aliprantis D., Ohyama H., Emtsev V.V., Oganesyanyan G.A. (2007). IR studies of oxygen – vacancy defects in electron-irradiated Ge-doped Si. *Physica B* 401 – 402, 487 – 490.
37. J.C. Mikkelsen Jr., *MRS Symp. Proc.* 59 (1986) 16.
38. Thomas Witting. Defect and impurity distributions in traditionally cast multicrystalline and cast monocrystalline silicon for solar substrates. Raleigh, North Carolina, 2008 m
39. Buika, G.; Getautis, V.; Martynaitis, V.; Rutkauskas, G. *Organinių junginių spektroskopija*. Vilnius, 2007. 66 – 69 p.
40. Qiaoyun Ma, Yangxian Li, Shuai Yang, Heyan Liu, Qiuyan Hao (2005). Infrared studies of the oxygen precipitation in fast neutron irradiated Cz –Si. *Materials Science and Engineering B* 122 218 – 221.
41. Mickevičius D. (1998). *Cheminės analizės metodai (1 dalis)*. Vilnius: Žiburys.

PRIEDAI

Priedas Nr. 1

$x := 0.0\text{€}$ bandinio storis cm

smaile 1107 cm⁻¹ (Oi)

$I_0 := 18.2\text{€}$ intensyvumas krintantis

$I := 16.45\text{€}$ intensyvumas praleistas

$$T := \frac{I}{I_0} \quad \text{pralaiduma}$$

$T = 0.9$

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 1.757$ koeficiento dimensija cm⁻¹

A - optinis tankis - bedimensinis dydis

$$A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$A = 0.046$

smaile 904 cm⁻¹ (VO2)

$I_0 := 19.73\text{€}$ intensyvumas krintantis

$I := 19.56\text{€}$ intensyvumas praleistas

$$T := \frac{I}{I_0} \quad \text{pralaiduma}$$

$T = 0.992$

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 0.14$ koeficiento dimensija cm⁻¹

$$A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$A = 3.646 \times 10^{-3}$

smaile 821 cm⁻¹ (VO)

$I_0 := 21.34\text{€}$ intensyvumas krintantis

$I := 21.08\text{€}$ intensyvumas praleistas

$$T := \frac{I}{I_0} \quad \text{pralaiduma}$$

$T = 0.988$

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 0.208$ koeficiento dimensija cm⁻¹

$$A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$A = 5.425 \times 10^{-3}$

Priedas Nr. 2

$x := 0.0\epsilon$ bandinio storis cm

smailė 1108 cm⁻¹ (Oi)

$I_0 := 18.77\epsilon$ intensyvumas krintantis

$I := 16.79\epsilon$ intensyvumas praleistas

$T := \frac{I}{I_0}$ pralaiduma

$T = 0.894$

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS A -optinis tankis - bedimensinis dydis

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right) \quad A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 1.863$ koeficiento dimensija cm⁻¹

$A = 0.049$

smailė 907 cm⁻¹ (VO2)

$I_0 := 20.44\epsilon$ intensyvumas krintantis

$I := 20.15\epsilon$ intensyvumas praleistas

$T := \frac{I}{I_0}$ pralaiduma

$T = 0.986$

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right) \quad A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 0.243$ koeficiento dimensija cm⁻¹ $A = 6.333 \times 10^{-3}$

smailė 822 cm⁻¹ (VO)

$I_0 := 22.20\epsilon$ intensyvumas krintantis

$I := 21.82\epsilon$ intensyvumas praleistas

$T := \frac{I}{I_0}$ pralaiduma

$T = 0.983$

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right) \quad A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 0.29$ koeficiento dimensija cm⁻¹ $A = 7.557 \times 10^{-3}$

Priedas Nr. 3

$x := 0.0\epsilon$ bandinio storis cm

smaile 1107 cm⁻¹ (Oi)

$I_0 := 17.6\%$ intensyvumas krintantis

$I := 15.65\%$ intensyvumas praleistas

$T := \frac{I}{I_0}$ pralaiduma

A - optinis tankis - bedimensinis dydis

T = 0.888

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right)$$

$$A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$$A = 0.051$$

$\alpha = 1.974$ koeficiento dimensija cm⁻¹

smaile 905 cm⁻¹ (VO2)

$I_0 := 19.07\%$ intensyvumas krintantis

$I := 18.99\%$ intensyvumas praleistas

$T := \frac{I}{I_0}$ pralaiduma

T = 0.996

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right)$$

$$A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 0.064$ koeficiento dimensija cm⁻¹ $A = 1.665 \times 10^{-3}$

smaile 823 cm⁻¹ (VO)

$I_0 := 20.79\%$ intensyvumas krintantis

$I := 20.68\%$ intensyvumas praleistas

$T := \frac{I}{I_0}$ pralaiduma

T = 0.994

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right)$$

$$A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 0.095$ koeficiento dimensija cm⁻¹ $A = 2.471 \times 10^{-3}$

Priedas Nr. 4

$x := 0.06$ bandinio storis cm

smaile 1108 cm⁻¹ (Oi)

$I_0 := 17.00$ intensyvumas krintantis

$I := 15.24$ intensyvumas praleistas

$T := \frac{I}{I_0}$ pralaiduma

$T = 0.897$

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS $A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$ A - optinis tankis - bedimensinis dydis

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 1.82$ koeficiento dimensija cm⁻¹

$$A = 0.047$$

smaile 902 cm⁻¹ (VO2)

$I_0 := 18.40$ intensyvumas krintantis

$I := 18.36$ intensyvumas praleistas

$T := \frac{I}{I_0}$ pralaiduma

$T = 0.997$

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right)$$

$$A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 0.043$ koeficiento dimensija cm⁻¹

$$A = 1.11 \times 10^{-3}$$

smaile 823 cm⁻¹ (VO)

$I_0 := 20.03$ intensyvumas krintantis

$I := 19.92$ intensyvumas praleistas

$T := \frac{I}{I_0}$ pralaiduma

$T = 0.994$

SUGERTIES KOEFICIENTO SKAICIAVIMAS

$$\alpha := \frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{1}{T}\right)$$

$$A := \log\left(\frac{1}{T}\right)$$

$\alpha = 0.093$ koeficiento dimensija cm⁻¹

$$A = 2.435 \times 10^{-3}$$

Priedas Nr. 5

Oi taskinio defekto absorbcijos koef. pokytis

$$\alpha_2 := 1.863$$

$$\alpha_1 := 1.757$$

$$\Delta\alpha := \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2} \right) 100$$

$$\Delta\alpha = 5.69$$

VO2 taskinio defekto absorbcijos koef. pokytis

$$\alpha_2 := 0.243$$

$$\alpha_1 := 0.14 \quad \Delta\alpha := \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2} \right) 100$$

$$\Delta\alpha = 42.387$$

VO taskinio defekto absorbcijos koef. pokytis

$$\alpha_2 := 0.29$$

$$\alpha_1 := 0.208 \quad \Delta\alpha := \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2} \right) 100$$

$$\Delta\alpha = 28.276$$

Priedas Nr. 6

Oi taskinio defekto absorbcijos koef. pokytis

$$\alpha_2 := 1.82$$

$$\alpha_1 := 1.974$$

$$\Delta\alpha := \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2} \right) 100$$

$$\Delta\alpha = -8.462$$

VO2 taskinio defekto absorbcijos koef. pokytis

$$\alpha_2 := 0.043$$

$$\alpha_1 := 0.064 \quad \Delta\alpha := \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2} \right) 100$$

$$\Delta\alpha = -48.837$$

VO taskinio defekto absorbcijos koef. pokytis

$$\alpha_2 := 0.093$$

$$\alpha_1 := 0.093 \quad \Delta\alpha := \left(\frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\alpha_2} \right) 100$$

$$\Delta\alpha = -2.151$$