

ŠIAULIŲ UNIVERSITETAS
FIZIKOS – MATEMATIKOS
FAKULTETAS
FIZIKOS KATEDRA

Rolandas Budzinskas

NETIESINĖ DIFUZIJA SUŽADINTUOSE SILICIO
KRISTALUOSE

Magistro darbas

Mokslinis vadovas
prof. habil. dr. A. Janavičius

Šiauliai, 2005

ANOTACIJA

Netiesinė difuzija sužadintuose silicio kristaluose

Šiame darbe nagrinėjami difuzijos reiškiniai Si kristaluose. Aprašytos pagrindinės difuzijos lygtis ir mechanizmai. Antroje dalyje, pasinaudojant rentgeno spinduliais sukurtomis vakansijomis, kurios padidina kristalo elektrinį laidumą, nagrinėjamos pagrindinės difuzijos charakteristikos (difuzijos koeficientas, elektrinis laidumas, vakansijų koncentracija). Gauti duomenys parodo difuzijos galimybes kambario temperatūros Si kristale.

SUMMARY

The nonlinear diffusion in excited crystalline silicon

This work analyses the phenomenon of diffusion in crystalline Si. Basic diffusion mechanisms and equations are described in the basic diffusion characteristics (diffusion coefficient, electrical conductivity and the concentration of vacancies) are analyzed by means of vacancies, what are generated by the beams of x – rays. The obtained facts suggest the makings of diffusion in crystalline Si at room temperature.

Turinys

Įvadas	4
1. Difuzija Silicio kristaluose	6
1.1. Difuzijos mechanizmai	6
1.1.1. Paprasti difuzijos mechanizmai	7
1.1.2. Kompleksiniai difuzijos mechanizmai	8
1.2. Tiesinė ir netiesinė difuzijos lygtis	13
1.3. Nelinijinė difuzija	15
2. Si kristalo difuzijos parametų skaičiavimas	21
2.1. p-Si kristalų elektrinis laidumas ir difuzijos koeficientas	21
2.2. n-Si kristalų elektrinis laidumas ir difuzijos koeficientas	29
Išvados	37
Literatūra	38

Įvadas

Silicis po deguonies labiausiai paplitęs cheminis elementas (27,6 %) (Данилов, 2001) Tai yra daugiau nei ketvirtadalį Žemės masės sudaro vien silicis. Mikroelektronikoje silicis užima labai svarbią vietą. Mikroelektroninės technikos gamyba ir integralinės schemos labai išpopuliarino šį visur esantį cheminį elementą. Šiais laikais technika bei naujausios technologijos braunasi bemaž į visą mūsų kasdienybę. Prieš tris dešimtmečius nebuvo įmanoma net numanyti, kad jie taip tvirtai įsišaknys mūsų gyvenime. Mūsų namų ūkiui talkina per šimtą mikroprocesorių „išikūrusių“ įvairioje buitinėje technikoje, pramogoms skirtoje aparatūroje, filmavimo kameroje, bevielio ryšio įrenginiuose, asmeniniuose kompiuteriuose ir žaisluose. Vien į mūsų automobilius įmontuota galbūt apie 50 mikroprocesorių. Žmogus šiais laikais turbūt ir dirbdamas, ir poilsiaudamas sunkiai apsieina be mikroelektroninių prietaisų.

Vykstant spartiems mikroelektronikos vystymosi tempams, ypač užsienio mokslininkai vis daugiau dėmesio skiria ir difuzijai. Nuo aštunto dešimtmečio ši tema mokslininkų pradedama vis labiau plėtoti. (Haddara, Bravman, 1998; Janavičius, 1998, 2002; Purlys, Janavičius ir kt., 2001 ir kt.)

Tyrimo aktualumas ir tyrimo problema. Gaminant lustus dažnai susiduriame su tokiomis problemomis kaip lustų užteršimas, juos gaminant reikiamų priemaišų įvedimas į lustą. Todėl iškyla būtinybė išsiaiškinti difuzijos procesus lustuose.

Tyrimo objektas. Difuzijos procesas silicio kristale.

Tyrimo hipotezė. Silicio kristalai kambario temperatūroje pasižymi geromis difuzinėmis savybėmis.

Tikslas. Išnagrinėti ir įvertinti difuzijos procesus silicio kristaluose.

Uždaviniai:

1. Išanalizuoti mokslinę literatūrą apie silicį ir difuziją.
2. Išnagrinėti difuzijos reiškinį ir jo mechanizmus.
3. Apskaičiuoti p-Si tipo kristalo pagrindines difuzijos charakteristikas, nustatyti difuzijos eigą, mechanizmus kristale.
4. Išanalizuoti gautus rezultatus ir palyginti su kitų silicio sistemų rezultatais. Išsiaiškinti difuzijos galimybes Si kristale.

Tyrimo metodai:

1. Mokslinės literatūros analizė.

2. Dedukcija.
3. Statistinė analizė.
4. Modeliavimas.

1. Difuzija Silicio kristaluose

1.1. Difuzijos mechanizmai

Analizuodami difuzijos mechanizmus remsimės Haddara, Bravman (1998) tyrimais. Difuzinio proceso tyrimai, kai taškinių defektų koncentracija yra nepusiausvyroje padeda geriau susipažinti su atominiu difuzijos mechanizmu, taškinių defektų fizika, chemija puslaidininkiuose ir legiruotų priemaišų difuzijos režimų perėjimu į puslaidininkius. Difuzijos procesuose svarbų vaidmenį turi taškiniai defektai.

Implantuotų priemaišų difuzija yra stipriai veikiama pažeistomis implantų detalėmis. Legiruotų priemaišų difuzija augimo metu yra veikiama fizikinių procesų specifiniu auginimo procesu, tokiu kaip Fermi lygio įtvirtinimas augančiame paviršiuje. Įaugusių priemaišų difuzijos modeliavimas augimo metu, atskiria visus šiuos efektus ir leidžia mums suprasti difuzijos proceso pagrindinius aspektus. Yra difuzijos pereinamas procesas legiruotų priemaišų augimo metu, suprantant, kad šie perėjimo procesai leidžia mums išvesti legiruotų priemaišų pusiausvyros difuzijos koeficientą ir difuzijos mechanizmo detales pusiausvyros sąlygomis.

Daug elementų buvo ištirti panaudojant p-tipo priemaišoms GaAs, įskaitant IV grupės elementus Si, Ge ir Sn, kurie yra Ga pusėje ir VI grupės elementai S, Se ir Te, kurie yra As pusėje. Iš jų Si yra bendriausias p-tipo priemaišų atstovas iš GaAs ir susietų medžiagų. Daugelis kitų elementų nenaudojami, nes difuzijos laipsnis yra per didelis, arba dėl to, kad jų atomų masė per didelė (implantacijos metu sukelia daugiau defektų). Si – palyginus lengvas atomas su patenkinamais persiskirstymais atideginimo metu. Kaip ir visi IV grupės elementai jis yra amorfiškas, gali būti klasifikuojamas ir III ir V grupėse tokiu būdu elgiasi ir kaip n-tipo, ir kaip p-tipo priemaiša. Bet vis dėlto, dauguma GaAs turtingu As, reikalauja Si, kad būtų n-tipo priemaiša. Šaltiniai Si yra taip pat lengvai pasiekiami legiruotoms priemaišoms tiek implantacijos, tiek išorinio sluoksnio augimo metu.

Kaip matome, p-tipo priemaišoms, iš II grupės elementų yra naudojami Be, Mg, Ca ir Zn. Visi šie p-tipo priemaišų elementai turi vieną problemą – labai didelį difuzijos koeficientą. Mg retai auginamas, dėl techninio užteršimo jį naudojant legiruoti kaip priemaišą. Implantacijai Be labiau tinka nei Zn, nes jo mažesnė masė sukelia mažesnius defektus gardelėje. Bet Be yra toksiškas, todėl yra bandoma su C. Nedidelė difuzija buvo stebėta ir įterpiant, ir įauginant C, tuo padarant jį patraukliu. Paties C naudojimas turi leisti pasiekti

aukštą elektrinį aktyvumą, kuris yra patvarus terminiam apdorojimui. (Haddara, Bravman, 1998)

1.1.1. Paprasti difuzijos mechanizmai

Fenomenologijoje pagal Haddara, Bravman (1998) vienmatė difuzija bet kokiame režime, gali būti aprašoma Fiko dėsnio.

$$J = -D\Delta C, \quad \frac{\partial C}{\partial t} = -\Delta J \quad (1)$$

Kur J – srautas ir C – difuzijos koncentracija. Visa difuzinio proceso fizika sueina į parametą D – difuzijos koeficientą, kuris yra temperatūros ir koncentracijos funkcija, tokiu atveju įvesdamas nelineines lygtis. Prognozinis difuzijos modeliavimas priverčia diferencijuoti dėl D , kuris reikalauja atomistinio mechanizmo supratimo, kur difuzantas migruoja pradinėje medžiagoje.

Patys paprasčiausi difuzijos mechanizmai – žiedinis, įterpimo ir vakansijos. (Haddara, Bravman, 1998)

Žiedinis mechanizmas. Pats paprasčiausias difuzijos mechanizmas pasireiškia tiesioginiu dviejų materialių taškų pakeitimu. Kristalinėje medžiagoje dideli iškreipimai kristalui nelabai tikėtini, kad yra susiję su tokiu pakeitimu. Labiau tikėtina, kad trys ar daugiau taškų gali dalyvauti cikliniame apsikeitime, kadangi tai sukelia mažesnius amplitudinius iškreipimus ir todėl turi mažesnes aktyvacijos energijas. Deja, tokios technologijos egzistavimas eksperimentiškai nepademonstruotas, todėl žiedinis mechanizmas visai nenaudojamas aiškinant difuzijos reiškinius. Šis mechanizmas bene vienintelis pasiūlytas literatūroje, kuris neapima taškinių defektų.

Tarpmazginis mechanizmas. Tai dažniausias difuzijos mechanizmas tarp tarpmazginių ištirpintų medžiagų (pvz.: Cu, Li, Si). Ši difuzija apima priemaišų atomų šuolius nuo vieno įterpimo defekto prie kito. Šie šuoliai energetiškai įmanomi mažam tarpmazginiam atomui, bet mažiau tikėtini dideliems atomams dėl kristalinės gardelės iškreipimų dalyvaujant šuolyje. Tačiau nedidelės tarpusavio sąveikos tarp išsisklaidančio materialaus taško ir aplinkinės srities gali sukurti daug kelių šiems šuoliams, tuo sumažindami kinetinį barjerą. Koreliacijos efektai pakeičia difuzijos rūšies defektinį difuzijos koeficientą ir padaro difuzijos mechanizmą nebe tarpmazginiu mechanizmu.

Vakansijų mechanizmas. Šis mechanizmas buvo pripažintas dominuojančiu priemaišų difuzijos mechanizmu į metalus. Elementarus difuzijos žingsnis šiame mechanizme

yra difunduojančio atomo arba jono šuolis iš gardelės į laisvą vietą. Todėl gardelės vakansijų srautas bus lygus ir priešingas difuzijos rūšių srautui. Efektinis difuzijos koeficientas priklausys nuo vakansijos tikimybei būti toje vietoje, kuri yra proporcinga vakansijų tarpų dalelėms gardelėje. Kaip ir su tarpmazginiu mechanizmu koreliacija gali apsunkinti mechanizmą. Ypatingai įdomias galimybes apsvarsto Kroger, formuodamas skylių – vakansijų poras, kur vakansijos surištos su difuzijos rūšimis. Tai padidina efektinį difuzijos koeficientą. Daug darbų buvo padaryta panaudojant šį mechanizmą, kad paaiškintų greitąją difuziją.

1.1.2. Kompleksiniai difuzijos mechanizmai

Paprasti difuzijos mechanizmai negali numatyti difuzijos atvejų susijusių su legiruotomis priemaišomis puslaidininkuose. Yra du dideli neatitikimai kvantiniu aspektu šiuose modeliuose.

Pirma, dominančios legiruotos priemaišos GaAs, kurios, turi būti pakeitimo būdu išsklaidytos, turi difuzijos koeficiento tarpininką tarp lėtų reikšmių, laukiamų norimam difuzatoriui ir daug didesnei reikšmei, laukiamai grynai tarpmazginiam mechanizmui.

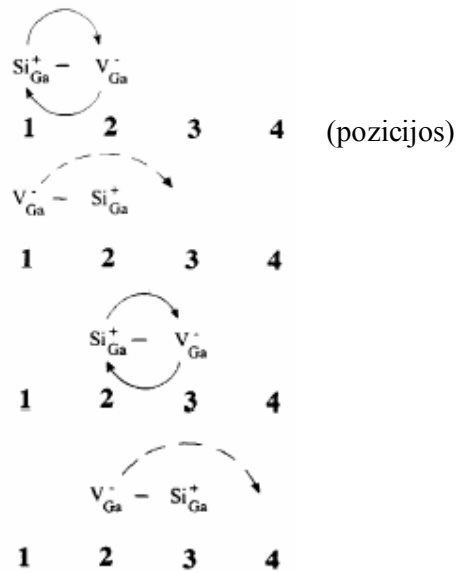
Antra, kai taškiniai defektai pasiekia koncentraciją didesnę nei 0,1%, defektų klasteriai ir priemaišų defektų kompleksai ir taškiniai defektai pradeda sąveikauti pagrindu su pertekliniais defektais. Taškiniu defektų koncentracija tokiu būdu negali būti nusakoma iš paprastų termodinaminių apmąstymų.

Antra užduotis, nebuvo sistemiškai paaiškinta moduliacijoje ir imitacijoje, nors keletas autorių, pasinaudojo tuo, kiekybiškai ir kokybiškai modeliuojant savo eksperimentus. Pirma užduotis buvo skirta, su tam tikrais pasiūlymais, daug kompleksiniams difuzijos mechanizams. (Haddara, Bravman, 1998)

Judrios nejudrios rūšis. Visi pagrindiniai difuzijos mechanizmai naudojami modeliuojant šiandien ir jie suprantami kaip kvazicheminė pusiausvyra tarp dviejų rūšių. Viena rūšis nejudri (ir paprastai indentifikuojama su priemaišomis vakansijose), tada kai kita – greitos difuzijos rūšis, kuri apima priemaišas. Kadangi vienu metu užrašomos ir sprendžiamos tolydžios lygybės visoms rūšims, kurios įtrauktos į pusiausvyros palaikymą tarp judrių ir nejudrių priemaišų, tai kiekybiniai prognozavimai gali remtis kiekvieno iš šių mechanizmų pagrindu. Nors skirtingi mechanizmai duos skirtingus atsakymus, viena charakteristika laikoma bendra. Legiruotų priemaišų efektyvi difuzija priklauso nuo $\partial C_{judrios} / \partial C_{visos}$, kuri gaunama iš viena laikių tolydžių lygčių rinkinių sprendimo.

Norint tiksliau numatyti priemaišų difuzijos koeficientą, difuzijos mechanizmas turi taip sudaryti keletą priklausomybių, kad difuzijos koeficientai būtų matomi demonstracijose. Difuzijos koeficientą veikiantys pagrindiniai efektai yra nešėjų koncentracijos ir arseno perteklinis slėgis. Abu efektai pakeičia difuzijos koeficientą, pakeisdami taškinių defektų koncentracijos termodinaminę pusiausvyrą. Be to, duomenys iš suardymo eksperimentų gali parodyti dominuojančio defekto tipą, atsakingą už difuziją GaAs viduje. Defektų parametrai turi būti suderinti su tokiais eksperimentais. Nors buvo daug darbų matuojant taškinių defektų (ypatingai vakansijų) koncentracijas, taip pat kaip ir teoriškai prognozuojant defektų parametrus, šie tyrimai dar nėra subrendę, kad juos būtų galima patikimai naudoti. Daugelis eksperimentinių situacijų paremtų paprastais termodinaminiais apsvaistymais negali būti analizuojami, nes defektų koncentracijos per didelės negu turėtų būti sukuriant susilpnintą sprendinį pirminio kristalo gardelėje. Todėl tai apriboja juos naudoti tiesioginiais matavimais arba defektų teoriniais prognozavimo parametrais jų modeliuose. Šios reikšmės ir toliau tinka parametrus, kurie bus išvedami iš difuzijos duomenų apie kuriuos kalbama literatūroje. Tuo metu keli kandidatai buvo pasiūlyti, kaip judrios rūšys. Du modeliai yra naudojami, paaiškinant visas priklausomybes, eksperimentinio stebėjimo legiruotų priemaišų difuzijos koeficientui GaAs. Si ir kitos n-tipo priemaišos yra laikomos donorų-vakansijų porų mechanizmu, kai Be ir kitos p-tipo priemaišos - pakeitiniu-tarpmazginiu difuzijos (SID) mechanizmu.

Legiruotų priemaišų-vakansijų porų mechanizmas. Porinis mechanizmas yra standartinis mechanizmas difuzijose su vakansijomis, kuriam padeda susidaryti legiruotų priemaišų-vakansijų poros. Legiruotų priemaišų atomai susiję su pirminio kristalo vakansijomis per Kuloninę jėgą (žr. pav. 1). Tokiu būdu didinama tikimybė netoli rasti vakansiją ir dėl to gauname didesnę difuzijos koeficientą, nei gryno mechanizmo metu. Priklausomybę nuo Fermi lygio gauname dėl rūšių krūvio, įtrauktų į porinę sąveiką.



1 pav. Vakansijų porų difuzijos mechanizmas. (pagal Haddarą, Bravman, 1998)

Porinę sąveiką galima užrašyti, kaip

$$S^{+1} + V^{-m} \Leftrightarrow (SV)^{1-m}, \quad (2)$$

Kur S nurodo susijusį priemaišinį atomą, ir m – vakansijos krūvis. Reakcija 2 yra rašoma donorams (akceptoriams poriniame vakansijų mechanizme, S būtų su -1 krūviu). Tarkime:

- Elektroninė pusiausvyra daug greitesnė nei bet koks kitas modelis.
- Reakcija (2) daug greitesnė už difuzinį procesą ir todėl paimta, kad pasiektų termodinaminę pusiausvyrą.
- Priemaišinių atomų porose koncentracija visada yra daug mažesnė nei nesuporuotų atomų koncentracija.
- Nesuporuoti atomai yra nejudrūs.

Šitie teiginiai mums leidžia parašyti:

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = \nabla \left(D_{SV} C_S \nabla \ln \left(C_S \frac{C_V n}{C_V^* n_i} \right) \right). \quad (3)$$

Lygybėje (3) D_{SV} duoda

$$D_{SV} = \sum_m D_m \left(\frac{n}{n_i} \right)^m \quad (4)$$

Kur D_m donorinio atomo efektyvus difuzijos koeficientas, vidinių inertinių sąlygų dėka susijęs su vakansija, kuri turi $-m$ užkrautą sritį. Difuzijai su neutralia vakansija, $m=0$.

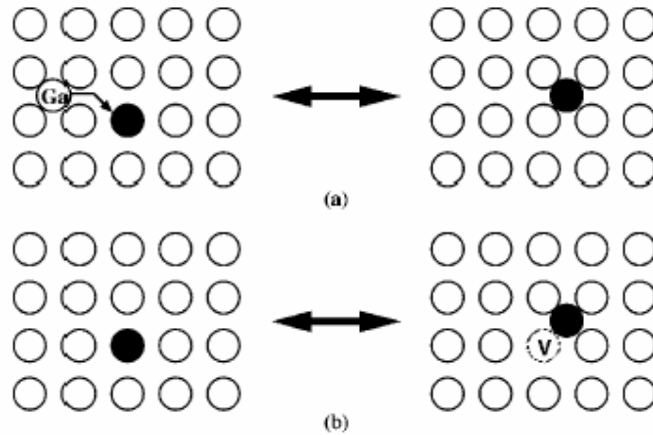
Lygybėje (3) parodyta, kad defektyvus difuzijos koeficientas – proporcingas porinio intarpų dalelių laiko difuzijos koeficientui. Taškinių defektų persisotinimas padidina

porų koncentraciją. Kad pasiektų termodinaminę pusiausvyrą, difuzijos koeficientas turi būti padidintas atsižvelgiant į taškinių defektų persisotinimą. Norint teisingai modeliuoti porinius difuzijos mechanizmus, mes turime spręsti remiantis (3) lygybe, tolydžią lygybę vakansijoms

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = \nabla \left(D_V C_V^* \nabla \frac{C_V}{C_V^*} \right) + \nabla(-J_{SV}) - k_R (C_I C_V - C_I^* C_V^*) + \varphi_V^{(S)} \quad (5)$$

Kur J_{SV} – legiruotų priemaišų srautas su įstatytomis poromis, k_R - legiruotų priemaišų-vakansijų rekombinacijų greitis, ir $\varphi_V^{(S)}$ - bet kokie nepriklausomi energijos šaltiniai ar vartotojai Ga įterpimo defektams. Difuzijos laikas (5) lygybėje priklauso nuo C_V/C_V^* gradiento, nes difuzijos lygybė turi priklausyti nuo rūšių cheminio potencialo gradiento.

Pakeitinis-tarpmazginis (SID) mechanizmas. SID modelyje judrios rūšys yra laisvų legiruotų priemaišų tarpmazgis. Esmė yra ta, kad legiruotų priemaišų atomai yra pasiskirstę tarp srities priklausančios aukštam-sprendžiamumui, kur jie yra elektriškai aktyvūs ir faktiškai nepajudinami, ir žemam-sprendžiamumui tarpmazgyje, kur yra elektriškai neaktyvūs, bet gali labai greitai išsiskaidyti. Įterpimo defekto tikslus santykis atomams priklauso nuo legiruotų priemaišų krūvio būsenos kiekvienu atveju, o rezultatai Fermi lygyje priklauso nuo legiruotų priemaišų efektyvaus difuzijos koeficiento. Todėl tai standartinis tarpmazginis mechanizmas, kuriam padeda taškiniai defektai.



2 pav. Pakeitinis-tarpmazginis (SID) mechanizmas. (pagal Haddarą, Bravman, 1998)

Apskritimai parodo priemaišų atomus. Schema (a) iliustruoja išmetimo modelį, kur pakeitimas yra su Ga įterpimo defektu ir (b) Frank-Turbull modelis, kur pakeitimas - su Ga vakansija.

SID mechanizmui galima užrašyti sujungtas difuzijos lygtis, kaip (3) ir (5) lygtyse. Pirmiausia nustatome taškinių defektų veikimo sąlygas mechanizme. Legiruotų

priemaišų atomų judėjimas nuo sumaišyto iki tarpmazgio (ir atvirkščiai) vyksta per sąveiką su GaAs taškiniais defektais. Legiruotos priemaišos gali spontaniškai peršokti iš vakansijos į tarpmazgį, savo vietoje palikdamos tuščią vietą. Tai vadinamas Frank-Turnbull mechanizmas. Alternatyviai, išmetimo mechanizmas įtraukia tarpusavio sąveiką tarp Ga įterpimo defektų ir legiruotų priemaišų. Ga įterpimo defektas išveja legiruotą priemaišą, kuri buvo tarpmazgyje ir užima jos vietą. Norint priemaišiniam atomui, grįžti į gardelę, priešingas procesas irgi yra svarbus. Šie mechanizmai parodyti 2 pav.

Tuo tarpu p-tipo priemaišų išmetimo reakcija duoda



Kur A_S^{-1} priklauso acceptoriniam atomui (neigiamo krūvio) vakansijoje, I_{Ga}^{k+} yra Ga įterpimo defektas, ir A_i^{j+} yra akceptoriais tarpmazgiuose. Viršutiniai indeksai parodo skirtingų rūšių krūvį. h^+ priklauso skylutėms, kurios dalyvauja sąveikoje, kad garantuotų krūvio neutralumą. Šia priklausomybe remiantis galime išreikšti legiruotų priemaišų difuzijos lygtį:

$$\frac{\partial C_S}{\partial t} = \nabla \left(D_{SID} C_S \frac{C_I}{C_I^*} \nabla \ln \left(C_A \frac{C_I n}{C_I^* n_i} \right) \right) \quad (7)$$

Kur (palyginus su lygybe (4))

$$D_{SID} = \sum_m D_i^j \left(\frac{p}{n_i} \right)^{j+i} \quad (8)$$

D_i^j legiruotų priemaišų įvedimo defekto difuzijos koeficientas krūvio būsenoje j .

Tolydžios lygtys vyraujančiam tarpmazgiui mechanizme suteikia:

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} = \nabla \left(D_I C_I^* \nabla \frac{C_I}{C_I^*} \right) + \nabla (-J_{KO}) - k_R (C_I C_V - C_I^* C_V^*) + \varphi_I^{(S)} \quad (9)$$

Kur J_{KO} legiruotų priemaišų srautas išmetimo reakcijoje. Šios sujungtos difuzijos lygtys turi būti sprendžiamos vienu metu, kad galima būtų modeliuoti difuzinį režimą pagal išmetimo mechanizmą.

Frank-Turnbull mechanizmas truputi skiriasi nuo išmetimo mechanizmo., kuriame yra vakansijos priklausomybė. Frank-Turnbull sąveika suteikia:



Lygybėse (7) ir (9) aprašomi išmetimo mechanizmai, kur pastebimos dvi svarbios charakteristikos. Pirma, difuzijos rūšių efektyvus difuzijos koeficientas yra proporcingas C_I / C_I^* . Antra, grynas difuzijos srautas iš taško A į tašką B sumažina Ga įterpimo defektus taške A ir juos prideda taške B per tolydžias defektų lygtys. Fizinė

priežastis šioms savybėms yra reakcijos charakteristika tarp vyraujančio tarpmazgio ir legiruotų priemaišų (žr. 2a pav.). Kaip matyti iš 2b pav., abu šie veiksmai yra tiksliai priešingi Frank-Turnbull difuzijos atveju. Todėl galime užrašyti

$$\frac{\partial C_S}{\partial t} = \nabla \left(D_{SID} C_S \frac{C_V}{C_V^*} \nabla \ln \left(C_S \frac{C_V p}{C_V^* n_i} \right) \right) \quad (11)$$

ir

$$\frac{\partial C_V}{\partial t} = \nabla \left(D_V C_V^* \nabla \frac{C_V}{C_V^*} \right) + \nabla (-J_{FT}) - k_R (C_I C_V - C_I^* C_V^*) + \phi_V^{(S)} \quad (12)$$

Kur D_{SID} yra nustatomas (8) lygybėje ir J_{FT} - priemaišinių atomų difuzijos srautas Frank-Turnbull mechanizme.

Palyginus (7) ir (9) lygybes su (11) ir (12) lygybėmis gauname, kad šie du mechanizmai duoda legiruotų priemaišų identišką profilį tada, ir tik tada, kai

$$\frac{C_I}{C_I^*} = \frac{C_V}{C_V^*} \text{ visiems } x \text{ ir } t.$$

Tai bus teisinga tada, ir tik tada, kai

$$C_I C_V = C_I^* C_V^*, \quad (13)$$

Kuri yra ekvivalenti pasakymui, kad reakcijoje



yra palaikoma pusiausvyra visur. Gali būti, kad išmetimo mechanizmas ir Frank-Turnbull mechanizmas parodys skirtingus režimus, jeigu (14) lygtis bus nepusiausviroje. (Haddara, Bravman, 1998)

1.2. Tiesinė ir netiesinė difuzijos lygtis

Difuzijos lygtis nagrinėjo A.J. Janavičius (2002). Juo remiantis galime teigti, kad tam tikros rūšies dalelės judėdamos visiškai netvarkingai pereina į tas sritis, kur duotos rūšies dalelių yra mažiau. Taip maišantis skirtingoms medžiagoms arba atomams, difuzijos proceso metu pernešama medžiaga.

Difunduojančių molekulių dujose, taip pat skysčiuose arba atomų kietame kūne srauto tankis nusakomas Fiko dėsniais:

$$I_D = -D \frac{d}{dx} n(x, t), D_d = \frac{1}{3} l \langle v \rangle, D_k = \frac{1}{6} d^2 v \exp\left(-\frac{(W_f + W_m)}{kT}\right),$$

$$l = \frac{1}{\sqrt{2ps^2n}} \langle v \rangle = 1.6 \sqrt{\frac{RT}{M}}. \quad (15)$$

Čia D_d - dujų savidifuzijos koeficientas, proporcingas vidutinio laisvojo kelio λ ir vidutinio greičio $\langle v \rangle$ sandaugai. πd^2 yra judančios dujų molekulės poveikio skerspjūvio plotas arba efektinis skerspjūvis. Difuzijos kietų kūnų D_k koeficientą gauname naudodamiesi Brauno dalelių nuokrypio kvadrato formule ($\langle x_N^2 \rangle = NL^2, N = \frac{t}{\tau}$, kur τ – vidutinė šuolio trukmė) ir Gibso pasiskirstymo formule atsižvelgdami į tai, kad trimačiu atveju pasirinkta kryptimi įvyks tik 1/6 viso skaičiaus elementariųjų netvarkingų d ilgio šuoliukų. Jų ilgis apytiksliai lygus pagrindiniams kristalo gardelės periodams. v yra difunduojančių dalelių šuolių dažnis. W_f ir W_m yra atitinkamai vakansijų formavimosi ir jų judėjimo (atomo persikimo į tuščią vietą) energijos, kurių sumą vykstant difuzijai, dalyvaujant vakansijoms arba kitiems difuzijos mechanizms vadiname difuzijos aktyvacijos energija W . Atsižvelgdami į aktyvacijos energijos temperatūrinę priklausomybę, pateiktą D_k išraišką, galime naudoti ir skysčių difuzijos koeficientams skaičiuoti.

Naudojantis formulėmis, nusakančiomis difunduojančias medžiagas (15), galime išvesti difuzines lygtis.

Išskirkime dujose tūrio V sritį, ribojamą uždaro paviršiaus S . Per šį paviršių į nagrinėjamą sritį dėl difuzijos per laiko vienetą patenka dalelių:

$$-\oint_S D \text{grad}(n) dS \quad (16)$$

$\text{grad}(n)$ yra dalelių skaičiaus tūrio vienetu $n(x,y,z,t)$ gradientas. Dalelių skaičius tūryje V per laiko vienetą pasikeis dydžiu:

$$-\int_V \frac{\partial n}{\partial t} dV \quad (17)$$

Pasinaudoję dalelių skaičiaus tvermės dėsniu ir sulyginę (2) su (3) randame

$$\oint_S D \text{grad}(n) dS = \int_V \frac{\partial n}{\partial t} dV. \quad (18)$$

Kairiajai lygybės pusei pritaikę Gauso-Ostrogradskio teoremą gauname lygybę:

$$\int_V \text{div}(D \text{grad}(n)) dV = \int_V \frac{\partial n}{\partial t} dV. \quad (19)$$

Ši lygybė galioja bet kokiam tūrio elementui, todėl galime užrašyti difuzijos lygtį:

$$\text{div}(D \text{grad}(n)) dV = \frac{\partial n}{\partial t} dV. \quad (20)$$

Perrašykime pirmą netiesinę difuzijos lygtį

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} (D(x)n) \quad (21)$$

ir antrą kitokios formos netiesinę lygtį:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial n}{\partial x} \right) \quad (22)$$

Užrašome pirmą ir antrą netiesines difuzijos lygtis naudodami baigtinių skirtumų metodą:

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} = \frac{1}{h^2} (D_{k+i} n_{k+1} - 2D_k n_k + D_{k-i} n_{k-1}), \quad (23)$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} = \frac{1}{h^2} (D_{k+\frac{1}{2}} (n_{k+1} - n_k) - D_{k-\frac{1}{2}} (n_k - n_{k-1})) \quad (24)$$

Lygtyje (9) difuzijos koeficientai priklauso tik nuo pusiausvyros padėties koordinatės, todėl šuolio tikimybė atstumu h iš vienos pusiausvyros padėties į kitą, kaip ir Brauno judėjimo atveju, nepriklauso nuo šuolio krypties. Todėl netiesinė lygtis (23) yra suderinama su Fokerio ir Planko lygtimi. Ji tinka difuzijai, vykstančiai kristalų tarpmazgiais, aprašyti. Tuo tarpu lygtyje (24) difuzijos koeficientas apibrėžiamas dviejų gretimų pusiausvyrų padėčių viduryje ir priklauso nuo jų abiejų būvio, dėl to ji nesuderinama su Fokerio ir Planko lygtimi. Tai atitinka tą atvejį, kai difuzija vyksta dalyvaujant vakansijoms. (Janavičius, 2002)

1.3. Nelinijinė difuzija

Lelijininę difuziją smulkiai yra išnagrinėta J. Janavičiaus darbuose (Janavičius, 1998). Iš kur matome, kad difuzijos koeficientas proporcingas priemaišų koncentracijai ir tai tiksliai nustatyta. Nagrinėsime nelinijinės difuzijos lygties atvejį išspręstą temperatūros ir koeficiento atžvilgiu, kuris priklauso nuo laiko specialiu būdu. Temperatūrinė funkcija $T(t)$ turi savybę laisvai pasirinkti laiką t_0 . Gauti analitiniai sprendiniai nustato difuzinį profilį temperatūros padidimui net ir sužadintų sistemų atveju, kai vakansijų ir priemaišų atomai nėra šiluminėje pusiausvyroje su tinkleliu. Nagrinėjant ryšį tarp temperatūros funkcijos ir sužadintų būsenų populiacijos aplinkinių atomų vakansijų atžvilgiu, nagrinėsime superdifuzijos galimybes.

Difuzijos koeficientas privalo būti lygus 0 srityje, kur nėra priemaišų. J. Janavičiaus (2002) knygoje nelinijinės difuzijos lygtis buvo pasiūlyta tokia:

$$\frac{d}{dt}N = D_n \frac{d}{dx} \left(N \frac{d}{dx} N \right), \quad (25)$$

kur difuzijos koeficientas ir esamas tankumas yra proporcingas priemaišų koncentracijai

$$D(t, N) = D_n N(x, t), \quad j = -D \frac{d}{dx} N, \quad (26)$$

$$D_n = \frac{D_0}{N_a} e^{-\frac{E}{kT}}, \quad T(t) = \frac{1}{a - b \ln(tc)}, \quad (27)$$

a, b, c – laisvai pasirenkamos konstantos. Jeigu $b=0$, turime izoterminę difuziją.

Nagrinėjame vienmatę difuziją apie maksimalų jų išsiskverbimo tašką x_0 , kai \square yra vidutinis kvadratinis dalelės nuokrypis įvykus elementariam τ trukmės šuoliui. Per vienetinį plotą x ašies ir priešinga kryptimi difundavusių tankius $N(x)$ galime išreikšti taip:

$$\frac{1}{2} N(x_0 - \frac{\Delta}{2}) \Delta, \quad \frac{1}{2} N(x_0 + \frac{\Delta}{2}) \Delta. \quad (28)$$

Jų skirtumas duoda Brauno dalelių srauto perneštam dalelių skaičiui per ploto vienetą ir laiką \square . Tuomet difunduojančių dalelių srovės tankis yra

$$j = \frac{\Delta}{2\tau} \left(N(x_0 - \frac{\Delta}{2}) - N(x_0 + \frac{\Delta}{2}) \right). \quad (29)$$

Atsižvelgiant į tai, kad priešais difunduojančių priemaišų frontą dalelių nėra, gauname:

$$\frac{1}{2} N(x_0 + \frac{\Delta}{2}) \Delta = 0, \quad (30)$$

Tada

$$j = - \left(\frac{\Delta^2}{2\tau} \right) \frac{N(x_0)}{N(x_0 - \frac{1}{2}\Delta)} \left(\frac{\Delta N}{\Delta} \right)_{x_0}, \quad \frac{\Delta N}{\Delta} = \frac{dN}{dx}. \quad (31)$$

Šią formulę galime perrašyti taip:

$$j = - \frac{D_c}{N(x_0 - \frac{1}{2}\Delta)} N(x_0) \left(\frac{dN}{dx} \right)_{x_0}, \quad \text{kur } D_c = \frac{\Delta^2}{\tau} = D_0 e^{-\frac{E}{kT}}. \quad (32)$$

Sulyginus (25), (26) ir (27) su (32), gauname:

$$\frac{D_c N(x_0)}{N(x_0 - \frac{1}{2}\Delta)} = \frac{D_0 e^{-\frac{E}{kT}} N}{N_a}. \quad (33)$$

Pasinaudojus (33) ir (32) randamas labai svarbus ryšys:

$$\frac{N(x_0)}{N\left(x_0 - \frac{1}{2}\Delta\right)} = \frac{N}{N_a}. \quad (34)$$

Ši sąlyga turi galioti ir, kai paviršius prisotintas priemaišomis iki N_s koncentracijos, todėl

$$N_a = N_s. \quad (35)$$

Nagrinėjant nelinejinės difuzijos sprendimą neizoterminiu atveju, manoma, kad priemaišų koncentracija patenkina šias kraštines sąlygas

$$N(0, t) = N_s, N(\infty, t) = 0 \quad (36)$$

ir pradinę sąlygą

$$N(x, 0) = 0 \quad (37)$$

Pristatant tokio pobūdžio kintamąjį

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{D_s t}}, D_s = D_n N_s \quad (38)$$

iš (25) rezultato galime gauti nelinejinę difuzijos lygtį

$$2 \frac{d}{d\xi} \left(f \frac{d}{d\xi} f \right) + \alpha \xi \frac{d}{d\xi} f = 0, \quad (39)$$

$$\alpha = 1 + \frac{Eb}{k}, \quad (40)$$

kur išreiškiame nelinejinės lygties sprendinį (25) laipsnine eilute

$$N(x, t) = N_s f(\xi), \quad (41)$$

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n, \quad (42)$$

Nuo ribinės sąlygos (36) gauname $a_0 = 1$. pakeičiant (41) ir (42) į (39) gauname lygčių sistemą

$$2 \sum_{m=0}^n (n+1-m)(m+1) a_{n+1-m} a_{m+1} + 2 \sum_{m=0}^n c_{nm} + n \alpha a_n = 0, \\ c_{nm} = (n+2-m)(n+1-m) a_{n+2-m} a_m, n=0, 1, 2, \dots \quad (43)$$

Priimant (42) koeficientų baigtinį skaičių ir (43) sistemos rezultatų sprendinį gauname antros eilės artutinius sprendinius:

$$N_3 = N_s \left(1 - \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{5}} \xi - \frac{\alpha}{10} \xi^2 - \frac{\alpha \sqrt{\alpha}}{60 \sqrt{5}} \xi^3 \right), 0 \leq \xi \leq \xi_{03}, \\ \xi_{03} = \sqrt{\frac{5}{\alpha}} (20^{\frac{1}{3}} - 2), x_{03} = 1.597 \sqrt{\frac{D_s t}{\alpha}}, 0 \leq x \leq x_{03}, \quad (44)$$

$$N_4 = N_s \left(1 - \frac{\sqrt{\alpha}}{2.253} \xi - \frac{\alpha}{10.15} \xi^2 - \frac{\alpha\sqrt{\alpha}}{148.1} \xi^3 + \frac{\alpha^2 \xi^4}{2792} \right), 0 \leq \xi \leq \xi_{04},$$

$$\xi_{04} = \frac{1.615}{\sqrt{\alpha}}, x_{04} = 1.615 \sqrt{\frac{D_s t}{\alpha}}, 0 \leq x \leq x_{04}, \quad (45)$$

$$N_5 = N_s \left(1 - \frac{\sqrt{\alpha}}{2.254} \xi - \frac{\alpha}{10.16} \xi^2 - \frac{\alpha\sqrt{\alpha}}{149.9} \xi^3 + \frac{\alpha^2 \xi^4}{2499} + \frac{\alpha^2 \sqrt{\alpha} \xi^5}{46361} \right), 0 \leq \xi \leq \xi_{05},$$

$$\xi_{05} = \frac{1.617}{\sqrt{\alpha}}, x_{05} = 1.617 \sqrt{\frac{D_s t}{\alpha}}, 0 \leq x \leq x_{05}, \quad (46)$$

iš viršuje paminėtų išreiškimų galime matyti, kad laipsninė eilutė konverguoja labai greitai. kai

$$0 < \alpha \leq 1, -k/E < b \leq 0. \quad (47)$$

galime išreikšti difuzijos koeficientą (27) kitu būdu

$$D_n(t) = \frac{D_0}{N_s} e^{-\frac{k}{c} a} t c^{\frac{k}{c} b}. \quad (48)$$

Kai $b=0$ turime izoterminę difuziją ir tada a turi būti didesnė už 0. Jeigu $b \neq 0$ temperatūros išreiškimui (27) turime savybę tam laiko momentui

$$t_0 = \frac{1}{c} e^{\frac{a}{b}}, b \neq 0. \quad (49)$$

Nuo (48) kai $b > 0$ ir $0 \leq t < \infty$ gauname $0 \leq D_n(t) < \infty$. Kai $b < 0$ gauname $\infty > D_n(t) \geq 0$ ir turime savybę $D_n(t)$ pradiniu laiko momentu. Tuo atveju, kai $b > 0$ turime sekančius intervalus temperatūrai:

$$0 \leq T(t) < \infty, 0 \leq t < t_0, \quad (50)$$

$$-\infty < T(t) \leq 0, t_0 < t < \infty. \quad (51)$$

Galime nagrinėti situaciją, kai $b < 0$ po difuzinės srities pakaitinimo lazerio impulsu arba panaudodami kitą radiaciją su mažu absorbcijos koeficientu pagrindo tinkleliui ir sužadintų vibracijos būsenų atomų apsupančių vakansijas rezonansinei absorbcijai.

$$-0 \geq T(t) > -\infty, 0 \leq t < t_0, \quad (52)$$

$$\infty > T(t) > 0, t_0 < t < \infty. \quad (53)$$

Vakansijų generacija Si ir Ge gali būti iššaukiama 2eV fotonais, ir vakansijų judėjimas Ge gali būti aktyvuotas fotonu su energijomis 1,25 eV (Janavičius, 1998). Neigiama absoliutinė temperatūra išreiškia atomų apsupančių vakansijas dviejų lygių vibracinių būsenų populiacijų santykius. Kada parametras α yra labai mažas, maksimalus priemaišų prasiskverbimas $x_{05}(46)$ yra labai didžiulis. Sąlyga (26) gali būti išpildyta dėl didėjančių temperatūrų $T(t_1) < T(t_2) < T(t_3)$ baigtiniame laiko intervale $t_3 < t_0$. Šios trys konstantos

temperatūrinėje išraiškoje (27) gali būti gaunamos iš bet kokių 3 skirtingų temperatūrų sekančiu būdu:

$$a = \frac{1}{T(t_1)} + \frac{\frac{1}{T(t_1)} - \frac{1}{T(t_2)}}{\ln\left(\frac{t_2}{t_1}\right)} \ln(t_1, c), \quad b = \frac{\frac{1}{T(t_1)} - \frac{1}{T(t_2)}}{\ln\left(\frac{t_2}{t_1}\right)},$$

$$c = \frac{1}{t_3} \left(\frac{t_2}{t_1}\right)^{\left(\frac{\frac{1}{T(t_1)} - \frac{1}{T(t_3)}}{\frac{1}{T(t_1)} - \frac{1}{T(t_2)}}\right)} \quad (54)$$

Nagrinėjant superdifuzijos koeficientą ir difuziją sužadintose dujose turime superdifuzijos koeficientą, kai α artėja į 0

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} b = b_0, \quad b_0 = -k/E, \quad (55)$$

ir maksimalus priemaišų (46) prasiskverbimas kristale

$$b_{0,As} = -2.396 * 10^{-5} \quad (56)$$

artėja į begalybę.

Konstantos b_0 gali būti apskaičiuotos panaudojant aktyvacijos energiją (38). Dėl fosforo ar arseno difuzijos silicyje, gauname

$$b_{0,P} = -4.198 * 10^{-5} \text{ K}^{-1}, \quad b_{0,As} = -2.396 * 10^{-5} \text{ K}^{-1}. \quad (57)$$

Iš (27) ir (49) galime gauti labai naudingą išraišką

$$bT(t) = -\frac{1}{\ln z}, \quad t = zt_0, \quad 0 \leq z \leq \infty. \quad (58)$$

Superdifuzija sužadintose sistemose gali būti gaunama, kai temperatūra panašiai kaip pav.2

$$T_0(t) = -\frac{1}{b_0 \ln z}, \quad t = zt_0. \quad (59)$$

Nagrinėjant šią problemą galime naudotis Boltzmann'o statistika dėl nustatymo dviejų kvantinių lygių su energijomis $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ populiacijų santykiu.

$$P = \frac{\omega(\varepsilon_2)}{\omega(\varepsilon_1)} = \exp\left(\frac{-E_{21}}{kT}\right), \quad (60)$$

kur $E_{21} = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$. Kai $P > 1$ turime $T < 0$.

Paimant temperatūrą iš (58) ir įdedant į (60) gauname

$$P = z^{\frac{E_{21} b}{k}} \quad (61)$$

Išreiškiant (25) lygties interpretaciją galime teigti, kad vakansijų mechanizmas gali būti realizuojamas atomams su energija daug kartų mažesne nei aktyvacijos energija. Dabar galime suprasti, kad, kai $b > 0$ turime difuziją su prisotinimo procesu. Ši situacija, kai

$P=z$, yra pristatyta pav. 1. Kai visi atomai apsupantys vakansijas yra sužadintoje vibracinėje būsenoje ε_2 turime $P=z^{-1}$ ir $b<0$. Iš (60) ir (61) seka, kad superdifuzija galima, kai

$$P = z^{-\frac{E_2}{k}}, E_{21} \geq E. \quad (62)$$

Šiuo atveju difuzijos atomų vibracijos lygiai ε_2 turi būti pilnai prisotinti pradinio laiko momentu. Pereinamasis greitis į pagrindinę būseną ε_1 yra didesnis, kai

$$E_{21} \geq E. \quad (63)$$

Iš (60) ir (61) randame, jog superdifuzija galima, kai atomai apsupantys vakansijas pradinio laiko momentu yra sužadintoje vibracinėje būsenoje.

Dėl praktinių skaičiavimų galime išreikšti maksimalų priemaišų prasiskverbimą (48) pasinaudojant (58) labai patogioje formoje

$$x_{05} = 1.617 \sqrt{\frac{D_0 z^\alpha}{\alpha}} t_0. \quad (64)$$

Pasinaudodami (48), (58) galime išreikšti panašumą kintamojo antru būdu

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{D_0 z^\alpha t_0}}. \quad (65)$$

Iš (65) ir (46) galime gauti, kad relaksacijos laikas τ yra apytiksliai lygus t_0 . Atsižvelgiant į anksčiau gautą ryšį $N_a=N_s$, $D_s=D_n N_s$ ir (61), (60), (38), (27) turime

$$D_s = D_0 z^{\frac{E_b}{k}}, P = z^{\frac{E_{21} b}{k}}. \quad (66)$$

Gautos lygties gali būti panaudotos tiksliai, kai

$$E_{21} = E. \quad (67)$$

Tada difuzijos koeficientas turi tenkinti sekantį ryšį

$$D = D_0 P. \quad (68)$$

Iš (9) ir (35) galime gauti

$$D_s(t) = D_0 P(t), P(t) = z^{\alpha-1}, t = z t_0. \quad (69)$$

Superdifuzijos koeficiento atveju $\alpha \rightarrow 0$. Kai sužadinimo energija E_2 , susilygina su aktyvacijos energija E , difuzijos koeficientas tiesiogiai proporcingas sužadintos būsenos populiacijai. Ši populiacija gali būti padidinta panaudojant specialių dalelių radiaciją, kurie gali sužadinti lokalias vibracines sritis iš atomų apsupančių vakansijas su pakankama energija, dėl difuzinių šuolių.

Kai α yra didelis ir z mažas, sužadintų sričių populiacijos yra mažos ir turime paprastą lėtą difuziją. Kai $\alpha < 0$ turime labai greitą difuziją stipriai sužadintoje sistemoje pradinio laiko momentu.

Difuzinės lygybės (25), (27) aprašo difuzijos ir šilumos laidumą sužadintose sistemose. Šiuo atveju medžiagų savybės, kaitinant ultratrumpu lazerio impulsu gali būti tiriamas.

Kai lokalių svyravimų dažnis kūnuose dėl atomų priemaišų nėra normalių svyravimų srityje, teigiame, kad rezonansinis absorbavimas gali būti suprstas ir gali būti gauta labai greita difuzija (55), (56). Nuo profilio pristatymo pav. 4, galime matyti, kad $b > 0$ ir $\alpha = 0,1$ maksimalus priemaišų prasiskverbimas mažai priklauso nuo difuzijos laiko, kai $t > 0,1t_0$. Ši situacija parodo nedidelę difuzijos inerciją ir sutampa su šilumine inercija ir šiluminio sužadavimo lokalizavimo greito kaitinimo lazeriu. Kai šiluma transportuojama elektroninėmis dujomis, kurios yra nepusiausvyroje su tinkleliu, ultragreito šilumos transportavimo efektas gali būti išlaikomas. Ultragreita difuzija galėtų būti suprasta, kaip vakansijų ir priemaišinių atomų nepusiausvyra su tinkleliu. Jie gali būti sužadinti impulsu 01,-0,4 MeV elektronais arba kaitinami ultratrumpais lazerio spindulių impulsais su rezonansiniu sugėrimu. Sąlygos dėl ultragreitos difuzijos priklausys nuo difuzijos tipo. Iš (69) galime matyti, kad difuzijos greitis nepriklauso nuo atomų apsupančių vakansijas populiacijų sužadintų vibracinių sričių, energijos, kuri apytiksliai lygi aktyvacijos energijai. Turime labai greitą difuziją, kai pradinio laiko momentu visos vakansijos sužadintos ir difuzijos koeficientas artėja į begalybę. Turėtume pradėti judėjimą labai greitų vakansijų ir jų generaciją. (Janavičius, 1998)

2. Si kristalo difuzijos parametrų skaičiavimas

2.1. p-Si kristalų elektrinis laidumas ir difuzijos koeficientas

Pasinaudodami elektrinio laidumo priklausomybe nuo laiko ir Holo judrumo dydžių rezultatų galime nagrinėti vakansijų judrumą. (Purlys ir kt., 2001) Vakansijų donorų, akceptorų sritys ir fotoefektas yra reikšmingi nustatant puslaidininkių elektros laidumą. Šie efektai svarbūs kieto kūno fizikai ir rentgeno spindulių detektorių degradacijai, žemų temperatūrų difuzijoms ir technologiniam kristalų augimui

Remiantis R. Purlio, J.A. Janavičiaus ir kitų (Purlys ir kt., 2001) atliktais bandymais su p-Si boro vakansijomis (Holo judrumas $\mu_{0H} = 237 \pm 5 \text{ cm}^2 / (Vs)$, $p_0 = 4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, $\sigma_0 = 1.51 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$).

Šiuose bandymuose buvo panaudoti rentgeno spinduliai vakansijų generavimui Si mėginio paviršiuje. Si vakansijos užima vieną kart neigiamos ir dukart neigiamos

akceptorius ir vieną kart teigiamo donoro rolę. Jie padidina Si mėginio laidumą (bandinio dydis buvo $3,33 \times 3,06 \times 3,09 \text{ mm}^3$). Kai kristale vyksta migracija, teigiamos ir neigiamos vakansijos elgiasi kaip donorai ir akceptoriai. Galime išreikšti vakansijų išsiskverbimo gylio x_0 priklausomybę nuo išsisklaidymo kristaluose prisotinimo ar įsiterpimo laiko t_0 , pasinaudodami (45), kaip

$$x = 1.615 \sqrt{D_v t_0}$$

kur vakansijų difuzijos koeficientas D_v gali būti išreikštas tokia forma:

$$D_v = D_0 e^{-\frac{\Delta H_m}{kT}} \quad (70)$$

Čia D_0 priešeksponentinis faktorius, o ΔH_m – entalpija arba vakansijų pernešimo energija. Dėl neutralių neigiamų ir teigiamų vakansijų ar tarpinių atomų Si mėginyje nugalėjimui buvo naudotas rentgeno vamzdis su vario anodu. Šiuo atveju mėginiai buvo apšvytinti minkštąja rentgeno spinduliuote ($\lambda \geq 1,7 \cdot 10^{-10} \text{ m}$) ir galima atkreipti dėmesį tiksliai į absorbcinį fotoefekto mechanizmą. Rentgeno spindulių intensyvumas Si mėginyje mažėja pagal eksponentę kaip:

$$I_B(E) = I_0(E) e^{-\mu(E)x} \quad (71)$$

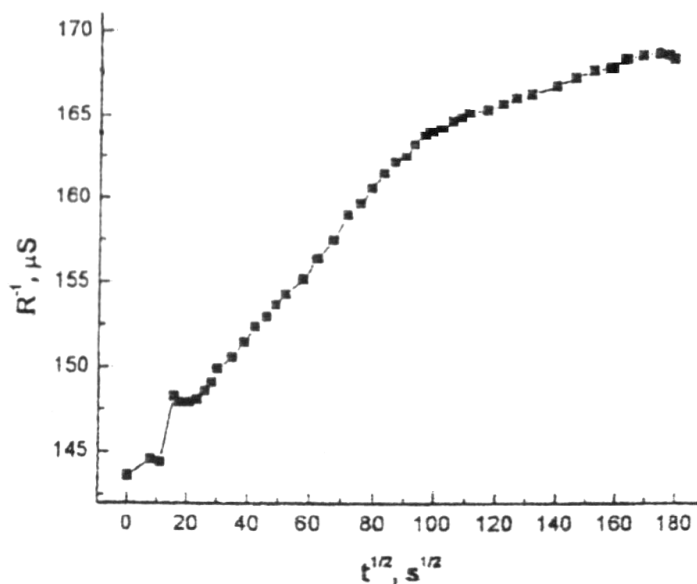
Absorbcijos koeficientas $\mu(E)$ gali būti nustatomas keičiant intensyvumą. Rentgeno prieš $I_0(E)$ ir gale $I_B(E)$ mėginių arba gali būti apskaičiuoti panaudojant sekančią formulę:

$$\sigma_f = \frac{CZ^k}{(h\omega)^n}, \mu = n_0 \sigma_f \quad (72)$$

Skerspjūviui σ_f fotoefekto ir absorbcijos koeficientas μ rentgeniui. Čia turime konstantą C , Z – bendras elektronų skaičius atome, $k=4$, $n=3,5$ rentgeniui ir n_0 -Si atomų koncentracija tūrio vienetu. Panaudojant skerspjūvį Al gauta $C=1,728 \cdot 10^{-81} \text{ m}^2 \text{ J}^{3,5}$. Tada Si apšviestam K_α Cu fotonais ($E=8,986 \text{ keV}$) gauname skerspjūvį $\sigma_f = 5.9 \cdot 10^{-25} \text{ m}^2$ fotoelektroninės elektronų emisijai ir absorbcijos koeficientui $\mu = 293 \text{ cm}^{-1}$ Si. Iš (72) rezultatų gavome $\mu = 145 \text{ cm}^{-1}$ fotonams kurių energija 11 keV. Gauti rezultatai parodo, kad fotonai su maksimalia energija (11 keV) negali palikti didelę dalį pločio $d = 3.09 \text{ mm}$ ir gali išsiskverbti tik iki $6.9 \cdot 10^{-3} \text{ cm}$.

Libiausiai absorbuojanti rentgeno fotonų sritis su energija $E = 8,986 \text{ keV}$ turi pakankamai energijos, kad sukurtų fotoelektronus ir valentinius elektronus vidiniuose K, L, M Si sluoksniuose. Jie laužo scheminius ryšius Si mėginio paviršiuje ir kuria vakansijas Si.

Tarpiniai atomai negali būti sukurti rentgeno, nes Si atomų išlaisvinimo energija $15,8 \text{ keV}$ pakankamai aukšta (Purlys ir kt., 2001).



3 pav. Laidumo priklausomybė nuo švitinimo laiko (pagal Purlį ir kt., 2001)

Iš eksperimentiškai išmatuoto pralaidumo I laiko priklausomybės galime gauti mėginio su vakansijomis prisotinimo laiką t_s . Teigiame, kad mėginys prisotintas su dviejų tipų neigiamom vakansijom. Išnagrinėjant srovės priklausomybę nuo $\sqrt{t_s}$, parodyto pav.3, kur t_s – švitinimo laikas (srovės vertė turi būti proporcinga sužadintų vakansijų ir $\sqrt{t_s}$ pralaidumui (45)). Matome, kad prisotinimo laikas $t_s = 200 \text{ min}$ gali būti gautas mėginiui su vienąkart neigiamomis vakansijomis su dideliu judrumu ir prisotinimo laikui $t_{s_2} = 415 \text{ min}$ lėtoms dukart neigiamoms vakansijoms (Purlys ir kt., 2001).

Pirmiausia turime apskaičiuoti vakansijų skaičių sukurtų mėginio paviršiuje. Boro vakansijų laidumas gali būti išreiktas taip:

$$\sigma_1 = p_1 e \mu_{p_1} \quad (73)$$

kur p_1 – skylių skaičius kubiniame centimetre ir μ_p – jų judrumas. Dėl tos pačios temperatūros ir skirtingos skylių koncentracijos p_2 turime

$$\sigma_2 = p_2 e \mu_{p_2} \quad (74)$$

Tada pasinaudojus žinomu laidumu (J.Janavičius, 2001) $\sigma_1 = 0.01 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ ir boro (akceptorių) koncentracija $p_1 = 3.1 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-1}$ nuo su $T = 300 \text{K}$ taip pat pralaidumu I/R parodytų pav.1 dėl prisotinimo Si nuo (73) ir (74) rezultatų randame skilčių koncentraciją $p_2 = 4.49 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-3}$.

Po švitinimo laiko $t_{S1} = 200 \text{ min}$ Si mėginys prisotinamas vieną kart neigiamomis vakansijomis ir įvedamomis dukart neigiamomis vakansijomis. Tada mėginio pralaidumas padidėja iki $1/R = 163 \mu\text{s}$. Tarkime, kad pralaidumo padidėjimas yra proporcingas papildomoms sklyučių koncentracijoms, sukurtomis vieną kart neigiamomis Δp_-^s (po to, kai švitinimo laikas $t_{S1} = 200 \text{ min}$) ir dukart neigiamomis Δp_{--} vakansijomis, turime $p_2 + \Delta p_-^s + \Delta p_{--} = 5.15 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Galime panaudoti skilučių tūrį $\Delta p_-^s + \Delta p_{--} = 0.66 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ įvestų pačių greičiausių vieną kart ir dukart neigiamų vakansijų įvertinimui mėginio tūryje V po pilno prisotinimo ($t_{S2} = 415 \text{ min}$) iš sekančios lygybės:

$$\frac{\Delta \sigma_2}{\Delta \sigma^s} = \frac{\Delta p_-^s + \Delta p_{--}}{\Delta p_-^s + \Delta p_{--}^s}, \quad (75)$$

kur $\Delta \sigma^s = 0.25 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$ - pralaidumo padidėjimas po to, kai pilnai prisotinamas Si mėginys neigiamomis vakansijomis ir $\Delta \sigma^s = 0.2 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$ yra pralaidumo padidėjimas po prisotinimo vieną kart neigiamomis vakansijomis. Tada iš paskutinės išraiškos turime:

$$\Delta p_-^s + \Delta p_{--}^s = 0.825 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (76)$$

$$\Delta p_-^s + \Delta p_{--} = 0.66 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (77)$$

Atsižvelgiant į (1) rezultatus randame

$$\frac{\Delta p_{--}}{\Delta p_-^s} = \left(\frac{200}{415} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (78)$$

po sistemos (76), (77) sprendimo gauname

$$\Delta p_-^s = 0.286 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}, \quad \Delta p_{--}^s = 0.539 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (79)$$

Apšvitinus, $0,309 \text{ cm}$ iš šono $0,33 \times 0,306 \text{ cm}^2$ storio Si mėginį, galime gauti sukurtų vieną kart neigiamų vakansijų skaičių ΔN_- ir dukart neigiamų vakansijų skaičių ΔN_{--} kaip

$$\Delta N_- = \Delta p_-^s V, \quad \Delta N_- = 0.9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}, \quad \Delta N_{--} = \Delta p_{--}^s V, \quad \Delta N_{--} = 0.17 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}.$$

Sukurtų ir įvestų į mėginį vakansijų skaičius, gali būti išreikštas, panaudojant nelineinę difuzijos teoriją pateiktą 1.3. skyriuje, kaip

$$\Delta N_v = 0.5492 N_{S1} x_{01}, \quad N_{S1} = 0.5 N_{vs},$$

kur N_{vs} - vakansijų koncentracija, apšvitintos pusės (N_{S1} - koncentracija atomų priemaišų ant paviršiaus priemaišų difuzijos iš pastovaus šaltinio (J. Janavičius, 1998) vienu momentu, $x_{01} = 0,309 \text{ cm}$ - ilgis tipinio krašto arba vakansijos prasiskverbimo gylio. Paskutinėje lygybėje turime D_v , vakansijų difuzijos koeficientą ir mėginio prisotinimo

vakansijomis laiką t_1 . Iš 3 pav. ir skaičiavimo rezultatų galime matyti, kad švitinimo laikas dėl prisotinimo mėginio su atskirai sužadintomis vakansijomis $t_2 = 415$ min. Tuo metu maksimalus skaičius vienažart neigiamų vakansijų mėginyje įvedama. Iš (Purlys ir kt., 2001). rezultatų galime gauti vienažart ir dukart neigiamų, kambario temperatūroje (apie 290 K), Si vakansijų koeficientą:

$$D_- = 3.05 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{s}, D_{-} = 1.47 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{s} \quad (80)$$

galime palyginti gautus rezultatus su difuzijos koeficiento išraiška Si vakansijoms, gautoms žemų ir aukštų temperatūrų eksperimente (Purlys ir kt., 2001):

$$D_v = 3 \exp\left(\frac{-1.0eV}{kT}\right) + 10^{-6} \exp\left(\frac{-0.2eV}{kT}\right) \text{ cm}^2 / \text{s} \quad (81)$$

Šioje formulėje kambario temperatūra $T = 300K$, gauname

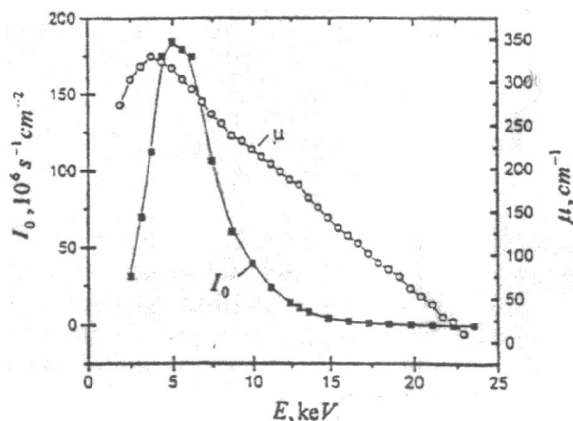
$$D_v = 4.4 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^2 / \text{s} \quad (82)$$

Išmatavus laidumo prisotinimo laiką, apskaičiavus vakansijų prasiskverbimo gylį, laidumo priklausomybę nuo laiko ir panaudojus nelineinės difuzijos lygties sprendinį, galime apskaičiuoti difuzijos koeficientą vienažart neigiamoms vakansijoms.

Donoro ir akceptorius sritys, sukurtos vakansijų difuzijos Si monokristaluose apšvitinus minkštuuju rentgenu, padidina Si monokristalo elektrinį laidumą. Matuojant laiko priklausomybę Si, kristalą apšvitinant rentgenu, nuo laidumo galima rasti vakansijų difuzinį koeficientą padarytą kambario temperatūroje. Todėl išmatuojame prisotinimo laidumo laiką sukeltą pasiskirsčiusiomis vakansijomis. Tai daug žadantis metodas, kadangi vakansijų judėjimas dominuojantis mechanizmas atominėje difuzijoje ir kristalų dislokacijų augime. Žemose temperatūrose difuzijos koeficientas paprastai gali būti išskaičiuotas iš elektroninių rezonansų parametrų ar infraraudonojo sugėrimo eksperimentų. Kad apskaičiuoti aukštos temperatūros difuzijos koeficientą pavyzdys turi būti įkaitintas iki tirpimo temperatūros ir nuslopintas išmatuotai temperatūrai. Nuslopavimo metodas netikslus, nes tai neleidžia nustatyti difuzijos koeficientų laidumo ir koncentracijos nežinomas (Janavičius ir kt., 2002).

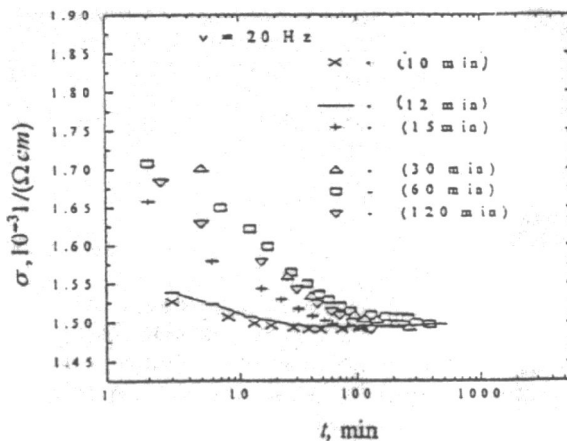
Panaudojant rentgeno spindulį vakansijų regeneracijai tipinių Si kristalų paviršiuje, vakansijos Si elgiasi kaip vienažart neigiami ir dukart neigiami akceptorai, kurie padidina mėginio pralaidumą (Janavičius ir kt., 2002). Aukšto pasipriešinimo $667 \Omega \text{ cm}$ p-Si (legiruotu su boru) mėginiai su išmatavimais $3,33 \times 3,06 \times 3,09 \text{ mm}^3$ buvo apšvytinti rentgenu. Neigiamos vakansijos migracijos metu kristale elgiasi kaip akceptorai ir padidina elektrinį pralaidumą. Pasinaudojus (45), (70), (71) ir (72) lygtimis galime apskaičiuoti absorbcijos koeficientą, tuo pačiu metodu kaip ir nagrinėjant elektrinį laidumą. Gauname $\mu = 12,8 \text{ cm}^{-1}$

rentgeno fotonams su 22 keV energija. Rezultatai parodo, kad tikrai fotonai su maksimalia energija (25 keV) gali palikti sluoksnį storio $d=3,09$ mm ir tai tik 8% jų pereis kristalą.



4 pav. Rentgeno spindulių ir absorbcijos koeficiento priklausomybė nuo bombarduojančių fotonų energijos (pagal Janavičių ir kt., 2002)

4 pav. matome, kad rentgeno lempos (kuri buvo panaudota matuojant anodo įtampa 20 – 25 kV), daugelis fotonų turi energiją mažesnę nei 10 keV ir dauguma fotonų yra absorbuojami paviršiuje. Jie suardo cheminius ryšius Si pavyzdžio paviršiuje ir generuoja vakansijas. Rentgeno spinduliai negali sukurti tarpmazginių atomų, nes dislokacijos energija 15,8 eV Si atomams pakankamai aukšta.



5 pav. Laidumo priklausomybė nuo laiko (pagal Janavičių ir kt., 2002)

Šios (žr. 5 pav.) kreivės naudojamos apskaičiuoti pavyzdžių su vakansijomis prisotinimui laikui. Taip pat šios kreivės parodo, kad pavyzdys prisotintas vieno tipo vakansijomis. Keisdami apšvitinimo periodus radome pavyzdžių prisotinimo laiką su atskirai sužadintoms vakansijomis aukšto judrumo: $t_s=15$ min. matome, kad prisotinimo laikas negali būti matuojamas dideliu tikslumu, ir šis faktas mažina visų matavimų tikslumą. (Janavičius ir kt., 2002)

Pirmiausia turime apskaičiuoti vakansijų skaičių, kurie buvo sukurti pavyzdžio paviršiuje. Si legiruoto boru pavyzdžio laidumas gali būti išreikštas kaip

$$\sigma = pe\mu_p \quad (83)$$

kur p yra skylių skaičius cm^3 ir μ_p yra jų judrumas. Duotoje temperatūroje ir judrumo laidumas priklauso nuo skylių koncentracijos. Pasinaudodami σ_1 ir p_1 įvertiname duotas (Janavičius A.J ir kt., 2002) ($\sigma_1=0,01 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, boro akceptorų koncentracija $p_1=3,1*10^{14} \text{cm}^{-3}$, $T=300 \text{K}$, ir išmatuotas pralaidumas $\sigma_2=1,5*10^{-3} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, apšvitintų vakansijų migracijos iš vidaus į kristalų paviršius (žr. pav.5), iš (83) rezultatų gavome sekančią pradinių skylių koncentraciją: $p_2=4,65*10^{13} \text{cm}^{-3}$.

Po apšvitinimo mėginio palaidumas pakyla iki $1,71*10^{-3} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, nes skylių koncentracija sukurta boro p_2 atomų ir vienos sužadintos akacijos Δp_2 tampa $p_2+\Delta p_2=0,682*10^{13} \text{cm}^{-3}$. Galime panaudoti vakansijų plokštumą $\Delta p_2=0,682*10^{13} \text{cm}^{-3}$ nustatyti vakansijų skaičiui įvestų į tūrį apšvitinimo metu:

$$N_v = \Delta p_2 V, \quad N_v = 2,13 \cdot 10^{11} \quad (84)$$

Rentgeno lempos anodinė įtampa 22kV , anodinė srovė buvo $15 \mu\text{A}$. Papuolančios radiacijos energetinis srautas išmatuotas liuminiscenciniu skaitliuku buvo $\Phi=1,22*10^{15} \text{eV cm}^{-2} \text{s}^{-1}$. vakansijos gali būti sukurtos fotonų sugertų paviršiaus sluoksnyje. Atomų koncentracija (Janavičius A.J ir kt., 2002) Si paviršiuje yra $N=6,8*10^{10} \text{cm}^{-2}$. Pasinaudodami kristalinio tinklelio Si periodu $a=0,682*10^{13} \text{cm}^{-3}$ ir absorbcijos koeficientu pavaizduotu 4 pav. ($\mu=330 \text{cm}^{-1}$) galime surasti absorbuotų fotonų dalį sluoksnio paviršiuje:

$$P = 1 - \exp[-\mu a] \quad (85)$$

Tik ši fotonų dalis gali padėti vakansijų generaciją. Daba galime apytiksliai įvertinti dalį energijos naudojamos sukurti vakansijas:

$$\Delta E = \Phi P S t_1, \quad \Delta E = 2,01 \cdot 10^{11} \text{eV} \quad (86)$$

Kur $S=0,333*0,306 \text{cm}^2$ yra apšvitinto kristalo plotas, $t_1=900 \text{s}$ yra minimalus apšvitinimo laikas būtinas mėginiui prisotinti vakansijomis. Dabar (84) ir (86) rezultatų galime rasti formavimo energiją vienos neigiamai sužadintos vakansijos $\Delta E/N_v=946 \text{eV}$. Vakansijų skaičius įvestas į mėginį gali būti išreikštas pasinaudojant šiek tiek pakeista (46) formule dėl atomų priemaišų skaičiaus įvestų difuzijos procese

$$N_v = 0,549 N_{S1} x_{01}, \quad N_{S1} = 0,5 n_{vs} \quad (87)$$

Čia $N_{vs}=2,51*10^{12} \text{cm}^{-1}$ yra vakansijų koncentracija apšvitinto paviršiaus pusėje, tiksliai iš jų judės į didesnę pavyzdžio dalį. N_{S1} yra priemaišų atomų koncentracija paviršiuje priemaišų difuzijos viena-dimensinis modelis iš nuolatinio šaltinio $x_{01}=0,309 \text{cm}$ yra pavyzdžio kraštinės ilgis arba jų maksimalus išsiskverbimo gylis (45) vakansijų difuzijos

atveju. Formulėje (45) D_v vakansijų difuzijos koeficientas ir t_1 yra pavyzdžio prisotinimo vakansijomis laikas. 5 pav. matome, kad apšvitinimo laikas reikalingas pavyzdžiui prisotinti neigiamomis vakansijomis yra lygus $t_1 = 15 \text{ min}$. Besitęsiant šiam minimaliam apšvitinimo laikui, maksimalus neigiamai sužadintų vakansijų skaičius įvedamas į pavyzdį. Dabar iš (45) rezultato galime gauti difuzijos koeficientą vakansijoms Si kambario temperatūroje (apie 290 K)

$$D_v = 5.30 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} \quad (88)$$

Iš 5 pav. galime matyti, kad visuose eksperimentuose su periodiniu apšvitinimu ilgesniuose nei 15 min, gavome pavyzdžio prisotinimą vakansijomis ir, kad vakansijos paliko pavyzdį per tą patį laiką $t = 87 \text{ min}$. Šis procesas gali būti aprašytas varikliu arba antros eilės difuzijos vakansija iš pavyzdžio. Antros eilės difuzijai turime sekantį santykį tarp pastovios vakansijų koncentracijos N_{S1} apšvitintame paviršiuje per pirmos difuzijos stadijos laiką t_1 (kol pavyzdys prisotinamas vakansijomis) ir vakansijų koncentracija N_{S2} po difuzijos antros stadijos laiko t , kol vakansijos palieka šį pavyzdį:

$$\frac{N_{S2}}{N_{vs}} = \frac{(D_v t_1)^{\frac{1}{3}}}{(D_v t_1 + D_2 t)^{\frac{1}{3}}} \quad (89)$$

Turime atkreipti dėmesį į

$$\frac{N_{S2}}{N_{vs}} = \frac{0.5 p_2}{p_2 + \Delta p_2} \quad (90)$$

iš (87) ir (85) rezultatų gauname laiką $t = 166 \text{ min}$. būtiną vakansijų pašalinimui iš pavyzdžio. Palygindami šį rezultatą su 2 pav. ir 1 lentele galime matyti, kad šis rezultatas apytiksliai sutampa su eksperimentiniu.

Pasinaudodami Si atomo žinoma koncentracija $5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ir (87) rezultatu, galime surasti vienąkart neigiamų vakansijų reliatyvią koncentraciją $N_r = 1.35 \cdot 10^{-10}$. Tada pasinaudodami žinoma lygybe (Janavičius A.J ir kt., 2002)

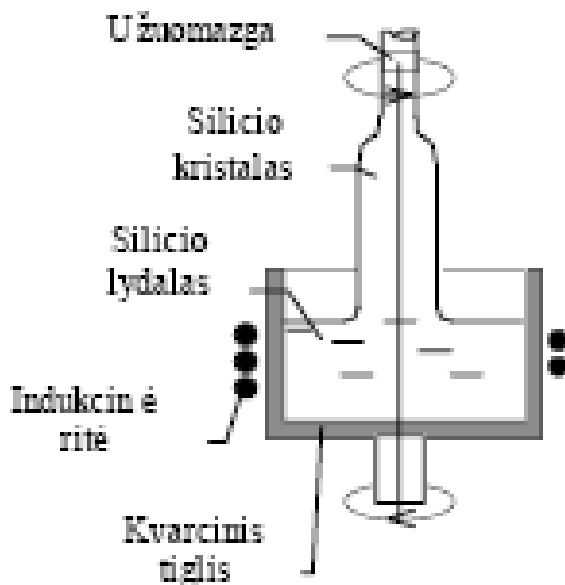
$$D = D_v N_z \quad (91)$$

surandame savidifuzijos koeficientą $7.15 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ kristaliniame Si kambario temperatūroje.

Gautas rezultatas gali būti palygintas su difuzijos koeficientu $D_{1v} = 1.48 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ ir $D_{2v} = 7.28 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ išdėstyta temperatūroms $T_1 = 160 \text{ K}$ ir $T_2 = 1685 \text{ K}$. Rezultatas $D_v = 5.30 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ sužadintoms vakansijoms gautos su dideliu tikslumu ir yra arti D_2 rezultato. (Janavičius A.J ir kt., 2002)

2.2. n-Si kristalų elektrinis laidumas ir difuzijos koeficientas

Remiantis J. Janavičiaus atliktais bandymų rezultatais ir 1.4. skyriuje pateikta metodika įvertinsime n-tipo, Czochralski'o metodu išauginto, kristalo elektrinį laidumą ir difuzijos koeficientą. Czochralski'o metodu išauginti silicio monokristalai yra geresnės struktūros. Taikant šį metodą, vakuuminėje kameroje į silicio lydala panardinama silicio monokristalo užuomazga (žr. 6 pav.) Šią užuomazgą lėtai traukiant iš lydalo ir intensyviai aušinant kristalo ir lydalo sąlyčio sritį, vyksta silicio kristalizacija. (Štaras, 2003)



6 pav. Silicio monokristalo auginimas Czochralski'o metodu (pagal Štarą, 2003)

Si kristalas buvo apšvitintas rentgeno spinduliais, panaudotas rentgeno vamzdis su vario anodu (rentgeno vamzdžio įtampa 10 kV , srovės stiprumas 23 mA). Įtampa tarp kristalo galų buvo 10 V , o kristalo matmenys – $0,3\text{ mm}$ storio ir $0,0039\text{ m}^2$ ploto. Rentgeno spinduliai silicio kristale generuoja vieną kart teigiamus, du kart teigiamus donorus ir vieną kart neigiamus akceptorius. Kaip ir su p-tipo siliciu, n-Si migracijos metu teigiamos ir neigiamos vakansijos elgiasi kaip donoriai ir akceptoriai, tuo padidindami kristalo laidumą.

Pirmiausia apskaičiuojame silicio atomų skaičių tūrio vienetė:

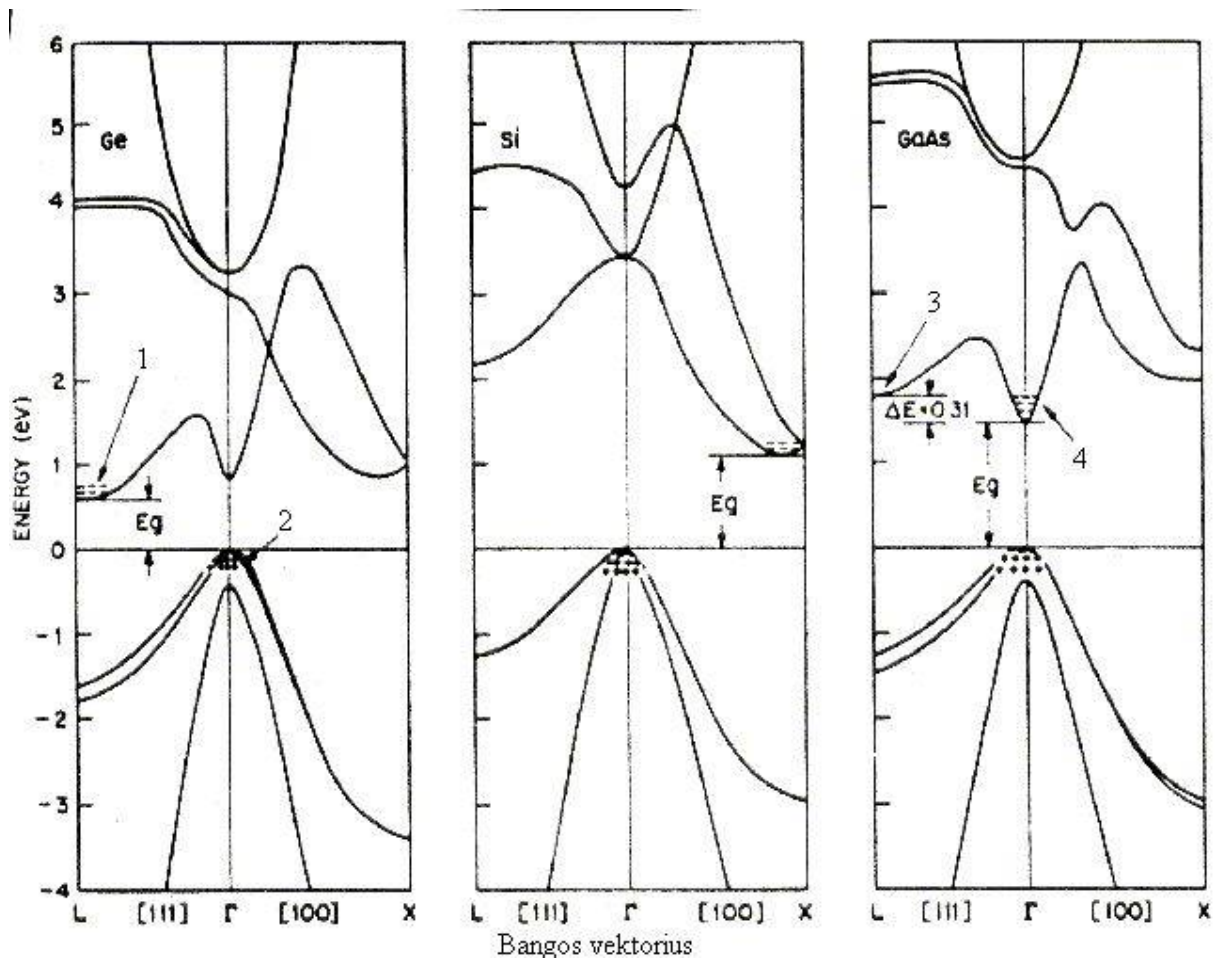
$$n_0 = \frac{N_A}{\mu_0} m \quad (92)$$

Kur m – Si masė vienetiniame tūrio vienetė ir lygi $2,33 \cdot 10^6\text{ g}$, μ_0 – molio masė lygi $28,09\text{ g/mol}$.

Gauname $n_0 = 5 \cdot 10^{28}$. Tada pasinaudodami (71), (72) formulėmis bei 1.4. skyriuje pateiktu C galime rasti kokios energijos turi būti rentgeno vamzdžio išspinduliuoti fotonai, kad pereitų mėginį. Apskaičiuojame absorbcijos koeficientą:

$$\mu = -\frac{\ln\left(\frac{I_B}{I_0}\right)}{x} \quad (93)$$

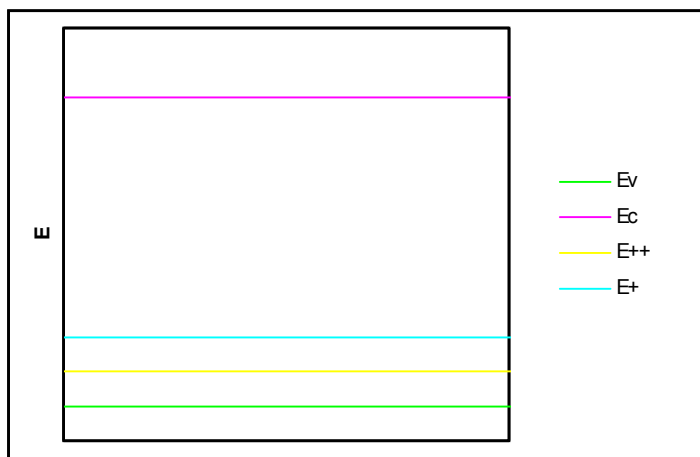
Gauname, kad norint, jog bent pusė fotonų pereitų Czochralski'o kristalą absorbcijos koeficientas turi būti lygus $\mu = 23 \text{ cm}^{-1}$. Žinant μ galime apskaičiuoti skerspjūvį $\sigma_f = 4,6 \cdot 10^{-26} \text{ m}^2$ ir rentgeno spindulių energiją $E = 18,6 \text{ keV}$ reikalingą fotonams pereiti Si. Esant fotonų energijai lygiai $15,8 \text{ keV}$, galės prasiskverbti tik iki $2,47 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$. (99 % visų spindulių)



7 pav. Energijos juostos Ge, Si ir GaAs: (1 – susikaupę elektronai, 2 – lengvos ir sunkios skylutės, 3 – aukštesnis slėnis, 4 – žemesnis slėnis)(pagal Van Zeghbreeck, 2004)

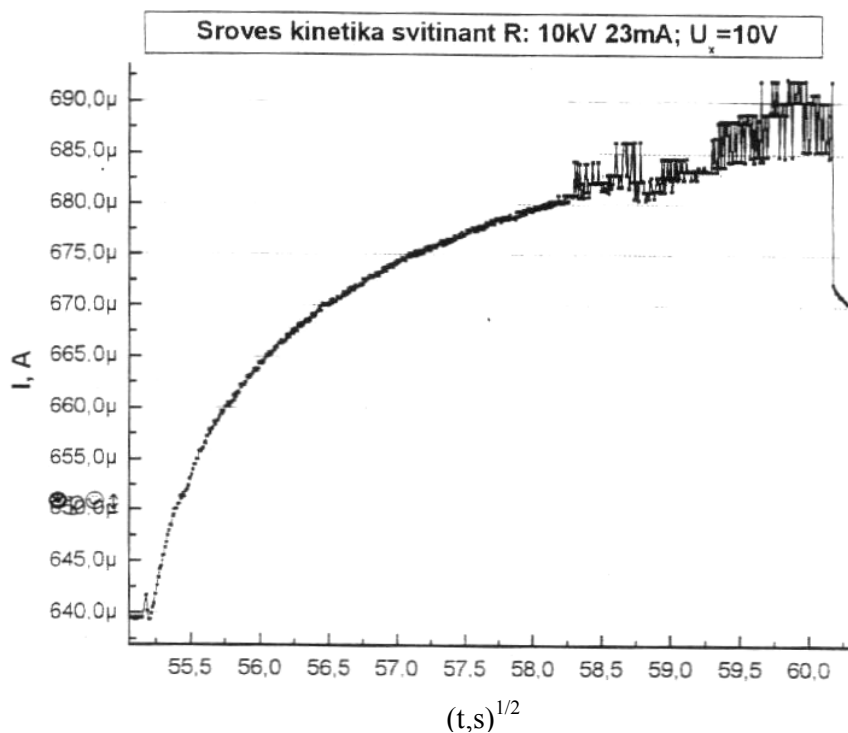
Puslaidininkinių energetinės juostos yra labai sudėtingos. Energija (žr. 7 pav.) parodyta kaip bangos ilgio funkcija, pagrindinėms kristalografinėms kryptims, nes diagramos

sritys priklauso nuo krypties kristale. Energetinė diagrama talpina kartotinių skaičių pilnai- užpildytų ir pilnai-neužpildytų zonų. Be to, yra daug dalinai užpildytų zonų.



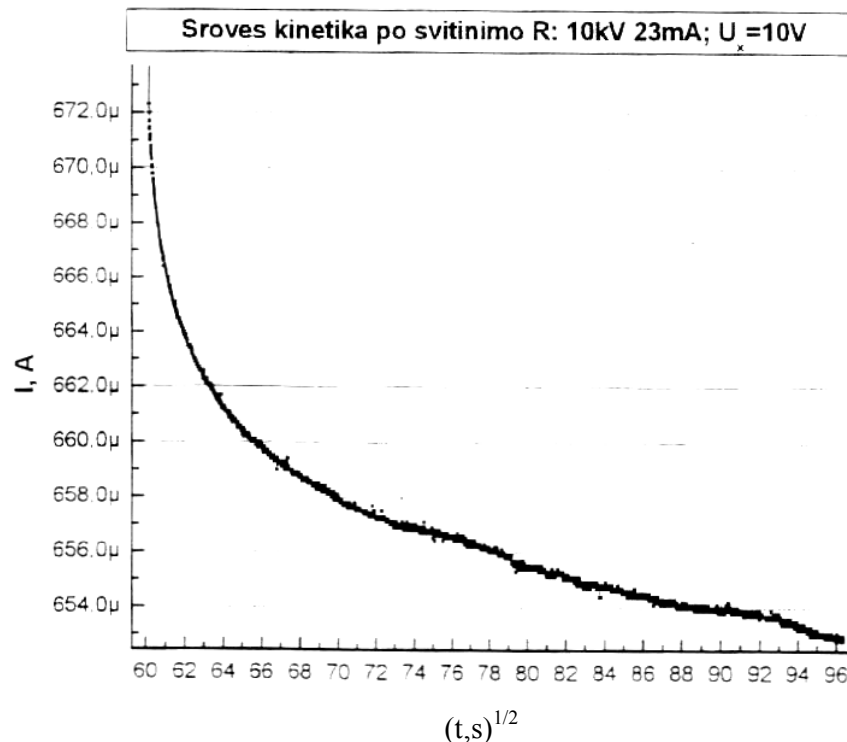
8 pav. Supaprastintos energijos juostos Si

Vis dėlto mes tokią sudėtingą energetinę diagramą galime supaprastinti (žr. 8 pav.), nes tik elektronai iš žemiausių dalinai-neužpildytų ir skylutės iš aukščiausių dalinai- užpildytų zonų turi didžiausią įtaką puslaidininkio elgesiui. Šios zonos pažymėtos + ir – atitinkamai nuo krūvio.



9 pav. Czochralski'o kristalo srovės kinetika jį švitinant rentgeno spinduliais. (pagal Janavičių, 2005)

Dukart teigiamos vakansijos yra arčiau laidumo juostos todėl krūvininkams reikia mažiau energijos norint peršokti į ją, todėl šios vakansijos yra greitesnės nei vieną kart teigiamos vakansijos, esančios toliau nuo laidumo juostos nei dukart teigiamos vakansijos (žr. 8 pav.). Atsižvelgiant į tai ir iš pateikto 9 paveikslėlio matyti, kad nuo kristalo apšvitinimo rentgeno spinduliais pradžios praėjus 50,86 minutėms kristale prasidėjo vakansijų generacija, srovės priklausomybė nuo laiko yra beveik tiesiška, todėl galime teigti, jog apšvitinimo pradžioje generavosi tik dukart teigiamos (greitosios) vakansijos ir tai tęsiasi apie 14 sekundžių. Po to kaip matome iš grafiko, tiesiška priklausomybė pereina į netiesinę, šiuo laiko momentu jau veikia dukart ir vieną kart teigiamos vakansijos. 53,58 min. nuo švitinimo pradžios dukart teigiamos vakansijos prisitotina (kreivė įgauna tiesės pavidalą) ir lieka tik vieną kart teigiamos vakansijos, kurios 56,65 minutę taip pat pasiekia soties būseną.



10 pav. Czochralski'o kristalo srovės kinetika po švitinimo rentgeno spinduliais. (pagal Janavičių, 2005)

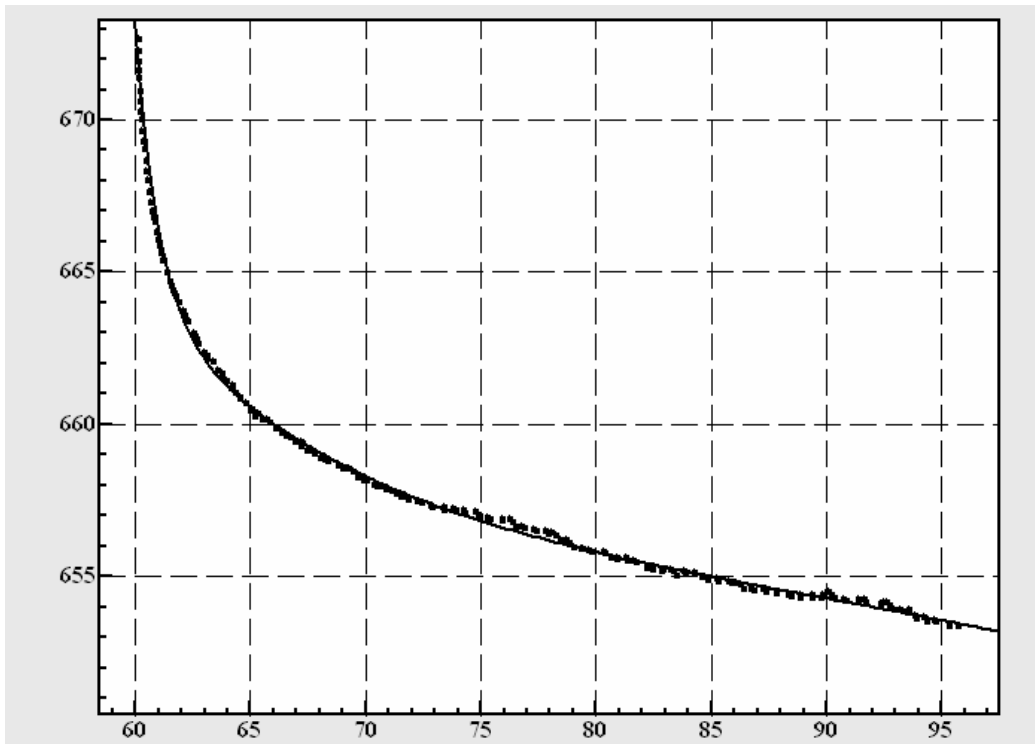
Kristalą baigus švitinti (žr. 10 pav.) srovė staigiai krenta, nes naujos vakansijos nebesukuriamos, o esant dideliame krūvininkų kiekiui, jos staigiai rekombinuoja, todėl mažėja krūvininkų skaičius ir srovė staigiai krenta. Kadangi krūvininkai greitai rekombinuojami, tai po 4 sekundžių srovės stiprio mažėjimas kristale sulėtėja, tapdama jau eksponentiškai mažėjančia priklausomybe nuo laiko. Praėjus dar minutei srovės kritimas tampa beveik laikui

tiesinė priklausomybė, kol nepasiekia pradinės savo reikšmės I_0 (I_0 - srovės stipris prieš pradėdant apšvitinimą).

Pasinaudodami duomenų statistinės analizės apdorojimo programa *LeoStatistic 10.5* ir srovės kinetikos (po švitinimo) eksperimentiniais duomenimis (pateiktais 10 pav.), galime aproksimuojant rasti srovės priklausomybės nuo laiko funkciją:

$$I(t) = 8.6 \cdot 10^2 - 0.87 \cdot t - \frac{1.8 \cdot 10^4}{t} + \frac{5.3 \cdot 10^5}{t^2} + \frac{10^{27}}{e^t} \quad [\mu\text{A}] \quad (94)$$

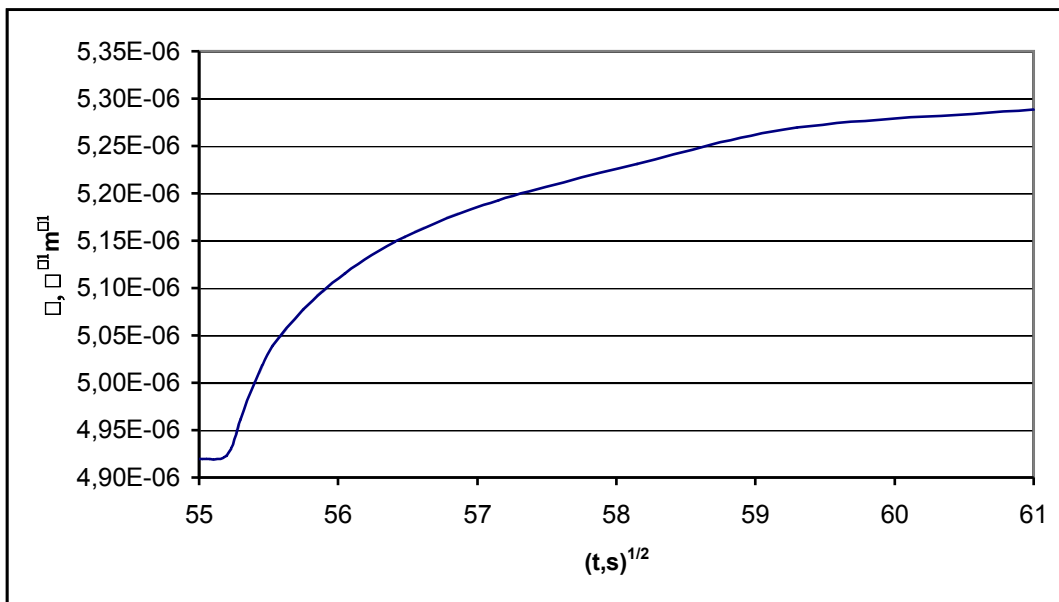
Paliginus eksperimentinius ir (94) lygybės gautus duomenys matome, kad jie nedaug skiriasi (žr. 11 pav.)



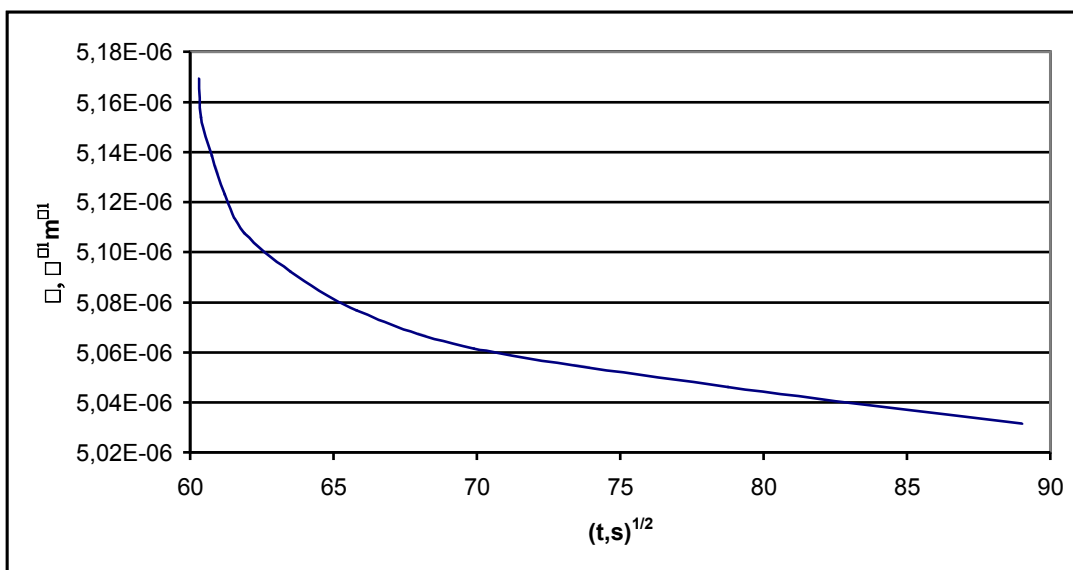
11 pav. Srovės priklausomybė nuo laiko (po švitinimo). Taškais pažymėtos eksperimentinės reikšmės, o kreivė – grafikas pagal (94) formulę.

Atlikus skaičiavimus su programa *LeoStatistic 10.5* matome, kad eksperimentiniai duomenys nuo empirinės formulės beveik nesiskiria, nes eksperimentinių reikšmių koreliacijos koeficientas su empirinėm reikšmėm artimas vienetui (0,951).

Iš srovės priklausomybės nuo švitinimo laiko galime rasti elektrinio laidumo priklausomybę nuo laiko.



12 pav. Elektrinio laidumo priklausomybę nuo laiko (švitinant kristalą)



13 pav. Elektrinio laidumo priklausomybę nuo laiko (po kristalo švitinimo)

Žinant prieš tai pateiktus samprotavimus ir pasinaudojant (45) formule, galime apskaičiuoti difuzijos koeficiento vertes „lūžio“ taškuose.

$$D_v = \frac{x^2}{2,608 \cdot t_0} \quad (95)$$

Gauname tokias difuzijos koeficiento reikšmes: vakansijų generacijos pradžioje – $D_v = 1,131 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$, pradėjus generuoti vieną kart teigiamas vakansijas – $D_v = 1,126 \cdot 10^{-11}$

m^2/s , prisisotinus dukart teigiamoms vakansijoms - $D_v = 1,073 \cdot 10^{-11} m^2/s$ ir prisisotinus vieną kart teigiamoms vakansijoms - $D_v = 1,015 \cdot 10^{-11} m^2/s$.

Krūvininkų judėjimas kietajame kūne, veikiant elektriniam laukui, yra panašus į jų judėjimą dėl koncentracijos gradiento, tai krūvininkų difuzijos koeficientai ir judrumai yra susieti taip vadinamu Einšteino sąryšiu:

$$\frac{D_v}{\mu_n} = \frac{kT}{q} \quad (96)$$

Iš čia išsireiškiame judrumą:

$$\mu_p = \frac{Dq}{kT} \quad (97)$$

Žinant, kad:

$$R = \rho \frac{x}{S} \quad (98)$$

ir

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \quad (99)$$

Bei pasinaudojus (83) gauname tokią elektrinio laidumo formulę:

$$\sigma = \frac{Dq^2 n}{kT}, \quad \sigma = \frac{Ix}{US} \quad (100)$$

Iš pirmos (100) formulės išreiškiame donorų koncentraciją n .

$$n = \frac{\sigma kT}{Dq^2} \quad (101)$$

$\frac{kT}{Dq^2}$ pažymėkime, kaip A .

Tarkime donorų išauktų skylių padidėjimas kristale yra proporcingas laidumo padidėjimui, tada galime panaudoti šias formules:

$$\frac{n + \Delta n_{++}}{n} = \frac{\sigma_1}{\sigma} \quad (102)$$

Kur σ_1 yra elektrinis laidumas, kai pradamos generuoti du kart teigiamos vakansijos.

Pertvarkius (102) ir pasinaudojus (101) formule, gauname dukart teigiamų vakansijų padidėjimą iki pradant generuoti vieną kart teigiamoms vakansijoms.

$$\Delta n = A(\sigma_1 - \sigma) \quad (103)$$

Tokius pat veiksmus atlikus ir su kitais „kritiniais“ (kaip pilnai prisisotina dukart teigiamos ir vieną kart teigiamos vakansijos) taškais:

$$\Delta n_{++}^s + \Delta n_+ = A(\sigma_2 - \sigma) \quad (104)$$

$$\Delta n_+^s + \Delta n_{++}^s = A(\sigma_3 - \sigma) \quad (105)$$

Be to, atsižvelgiant į (45) formulę, galime paimti tokį santykį:

$$\frac{\Delta n_{++}}{\Delta n_{++}^s} = \left(\frac{53.58}{51.10} \right)^{1/2} \quad (106)$$

Išspręsdami (103), (104), (105) ir (106) lygčių sistemą randame kiek susigeneravo dukart teigiamų vakansijų $\Delta n_{++}^s = 1.14 \cdot 10^{21}$ ir vieną kart teigiamų vakansijų $\Delta n_+^s = 3.22 \cdot 10^{21}$. Pasinaudojus (84) formule ir žinodami, kad $V = x \cdot S$ randame sukurtų dukart teigiamų vakansijų skaičių ΔN_{++} ir vieną kart teigiamų vakansijų skaičių ΔN_+ .

$$\Delta N_{++} = 1,34 * 10^{15} m^{-3}; \quad \Delta N_+ = 3,76 * 10^{15} m^{-3}.$$

Išvados

1. Apskaičiavus n-Si nustatyta, kad elektrinis laidumas dukart teigiamų vakansijų kristale lygus $5,17 \cdot 10^{-6} \Omega^{-1} m^{-1}$ ir vieną kart teigiamų vakansijų $5,23 \cdot 10^{-6} \Omega^{-1} m^{-1}$, bei difuzijos koeficientas dukart teigiamų vakansijų yra lygus $1,073 \cdot 10^{-11} m^2/s$, ir difuzijos koeficientas vieną kart teigiamos vakansijos - $1,015 \cdot 10^{-11} m^2/s$.
2. Palyginus gautus p-Si duomenis su n-Si matome, kad difuzijos koeficientas daug didesnis p tipe, nei n-Si kristale.
3. Iš eksperimentinių duomenų randame tokią empirinę srovės (po švitinimo) funkciją nuo laiko: $I(t) = 8.6 \cdot 10^2 - 0.87 \cdot t - \frac{1.8 \cdot 10^4}{t} + \frac{5.3 \cdot 10^5}{t^2} + \frac{10^{27}}{e^t}$ [μA]. Eksperimentinės vertės gerai sutampa su empirinės formulės vertėmis (koreliacijos koeficientas lygus 0,951).
4. Remdamiesi gautais rezultatais galime teigti, kad Si pasižymi geromis difuzijos savybėmis kambario temperatūroje ir tinka naudoti lustų gamyboje, nes jis labai paplitęs, ne toksiškas bei rentgeno spinduliais sugeneruotos Si tiek teigiamos, tiek neigiamos vakansijos padidina kristalo laidumą.

Literatūra

1. Haddara, Y. M. Bravman, J. C. (1998). Transient diffusion of beryllium and silicon in gallium arsenide//Annual reviews material sciences. Vol.28:185-214.
2. Janavičius A. J., Banys J., Purlys R., Balakauskas S. (2002). The diffusion coefficient of vacancies excited by X-ray in monocrystalline Si//Lithuanian journal of physics.. No. 5, 337-340.
3. Janavičius A. J. (1998). The nonlinear diffusion in the nonisothermal case//Acta physica Polonica A. Vol. 93. No.3.
4. Janavičius A. J. (2002). Atsitiktiniai procesai ir pernešimo reiškinių lygtys. Šiauliai: VšĮ Šiaulių universiteto leidykla.
5. Purlys R., Janavičius A. J., Mekys A., Storasta J. (2001). Electrical conductivity of Si and GaAs monocrystals excited by soft X-ray//Lithuanian journal of physics. No. 4-6, 376-380.
6. Štaras S. (2003). Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai. Vilnius: Mokslo ir enciklopedijų leidykla.
7. Van Zeghbroeck B. (2004). Principles of semiconductor devices. [žiūrėta 2005-02-18].//Prieiga per Internetą: <<http://ece-www.colorado.edu/~bart/book/>>
8. Данилов И.В. (2001). Кремний. [žiūrėta 2005-03-20].// Prieiga per Internetą: <<http://www.5ka.ru/93/21875/1.html>>