

**ŠIAULIŲ UNIVERSITETAS**  
**GAMTOS MOKSLŲ FAKULTETAS**  
**FIZIKOS KATEDRA**

**MINDAUGAS KIRILIAUSKIS**

**VAKANSIJŲ IR PRIEMAIŠŲ ATOMŲ DIFUZIJA SILICYJE,  
INICIJUOTA RENTGENO SPINDULIAIS**

Magistrantūros studijų programos “Fizika”

**MAGISTRO DARBAS**

Mokslinis vadovas

doc. dr. Romaldas PURLYS

Konsultuojantysis dėstytojas

prof. habil. dr. A. J. JANAVIČIUS

**Šiauliai, 2009**

## ANOTACIJA

Magistro darbą „Vakansijų ir priemaišų atomų difuzija silicyje, inicijuota Rentgeno spinduliais” sudaro įvadas, dvi dalys, išvados ir naudotos literatūros sąrašas. Darbo apimtis 34 puslapiai. Darbe yra 16 paveikslų, 3 lentelės.

**Pirmoje dalyje** – “Teorinė dalis” – supažindinama su darbo teorija, pateikiami elektriniai ir Rentgeno spinduliuotės Brego atspindžio metodai, tinkantys vakansijų koncentracijai ir vakansijų difuzijos koeficientams silicyje skaičiuoti.

**Antroje dalyje** – „Praktinė dalis“ – eksperimentiniams matavimams pritaikomi Rentgeno spinduliuotės Brego atspindžio metodai, tinkantys vakansijų koncentracijai ir vakansijų difuzijos koeficientams silicyje skaičiuoti. Gautos vakansijų koncentracijos, naudojant Brego atspindžius, sutampa su elektrinių matavimų rezultatais, kas rodo teorijos teisingumą.

## ANNOTATION

The topic of master's work is “Vacancies and impurities atoms diffusion in silicon, generated by X-rays”. The master's work consists of introduce, two parts, conclude and the list of used literature. The size of the work is 34 pages. This work has 16 pictures and 3 tables.

**In the first part** – “The theoretical part” – are introduced to the work's theory, are given electrical and X-rays radiation Bragg's reflection methods for calculations of concentration of vacancies and diffusion coefficients of vacancies in silicon.

**In the second part** – “The practical part” – X-rays radiation Bragg's reflection methods are applied for experimental measurements for calculations of concentration of vacancies and diffusion coefficients of vacancies in silicon. Gotten concentrations of vacancies using Bragg's reflections coincide with electrical results of measurements, that proves correctness of theory.

## TURINYS

<b>IVADAS</b> .....	<b>4</b>
<b>I. TEORINĖ DALIS</b> .....	<b>6</b>
1.1. SILICIS.....	6
1.2. TAŠKINIAI DEFEKTAI SILICIO KRISTALE.....	8
1.3. VAKANSIJŲ GENERAVIMAS MINKŠTAIS RENTGENO SPINDULIAIS.....	10
1.4. ELEKTRINIAI TAŠKINIŲ DEFEKTŲ TYRIMO METODAI.....	14
1.5. BREGO ATSPINDŽIO TAIKYMAS GARDELĖS DEFEKTŲ ANALIZEI .....	17
1.6. BREGO ATSPINDYS IR DIFUZINĖ SKLAIDA.....	19
1.7. BREGO ATSPINDŽIO TAIKYMAS VAKANSIJŲ KONCENTRACIJAI MATUOTI.....	23
1.8. BREGO ATSPINDŽIO TAIKYMAS VAKANSIJŲ DIFUZIJAI TIRTI. ....	25
<b>II. PRAKTINĖ DALIS</b> .....	<b>27</b>
2.1. EKSPERIMENTINIAI REZULTATAI IR JŲ TEORINIS APIBENDRINIMAS .....	27
<b>IŠVADOS</b> .....	<b>32</b>
<b>LITERATŪROS SĄRAŠAS</b> .....	<b>33</b>

## IVADAS

Paprastai Rentgeno spinduliai naudojami biomedicininiais tikslais, tačiau puslaidininkų ir Rentgeno spindulių sąveika yra svarbi problema. R. Purlio ir kt. (2001) straipsnyje nurodyta, kad Rentgeno spinduliams sąveikaujant su Si pavyzdėliu, generuojamos vieną kart ir du kart neigiamos, teigiamos ir neutralios vakansijos. Vieną kart ir du kart neigiamos vakansijos elgiasi kaip vieną kart ir du kart užkrauti akceptorai, o teigiamos vakansijos elgiasi kaip donorai (Matare, 1971). Taigi, švitinant silicio pavyzdėlį ir generuojant vakansijas jo paviršiuje, vakansijos skverbiasi į kristalo tūrį, tuo būdu keisdamos kristalo elektrinį laidumą. Matuojant švitinamo pavyzdėlio elektrinio laidumo kitimo priklausomybę nuo laiko ir nubrėžus elektrinio laidumo priklausomybės nuo šaknies iš laiko grafiką, pastebimos tiesinės dalys. Šios tiesinės dalys neabejotinai susijusios su skirtingų vakansijų pasiskirstymu po silicio tūrį (žr. skyrių “Elektriniai taškinių defektų tyrimo metodai”). Judriausios yra vieną kart neigiamos vakansijos (Bubenikov, 1989), o mažiau judrios – du kart neigiamos vakansijos (Bubenikov). Remiantis šiuo grafiku ir netiesinės difuzijos lygtimi (Janavičius, 1997), buvo gauti šių vakansijų difuzijos koeficientai kambario temperatūroje (apie 290 K). Vieną kart neigiamoms vakansijoms gauta difuzijos koeficiento vertė –  $D_{-} = 3.05 \cdot 10^{-6} \frac{cm^2}{s}$  (Purlys, 2001), du kart neigiamoms –  $D_{-} = 1.47 \cdot 10^{-6} \frac{cm^2}{s}$  (Purlys). Be Rentgeno spinduliuotės, įprastu būdu, kambario temperatūroje (300 K) vakansijų difuzijos koeficientas silicyje –  $D_v = 4.4 \cdot 10^{-10} \frac{cm^2}{s}$ . Taigi, veikiant Rentgeno spinduliuotei, vakansijų difuzijos koeficientas silicyje kambario temperatūroje yra daugiau nei tūkstantį kartų didesnis nei neveikiant Rentgeno spinduliuotei, o švitinamas kristalas yra tam tikroje sužadintoje būsenoje, kurios fizikinės savybės kitokios.

Galima įtarti, kad jei Rentgeno spinduliuote švitinamo silicio vakansijų difuzijos koeficientas labai didelis, tai ir pakeitimo priemaišų atomų difuzijos koeficientas labai didelis.

Šiuo metu taikomas būdas, kurio metu priemaišos į puslaidininkį yra įterpiamos veikiant labai aukšta, tūkstančio laipsnių, temperatūra. Taikant šį metodą, priemaišos į puslaidininkį įsiskverbia tik kelis mikrometrus ( $10^{-6}$  m) per kelias valandas, taip pat formuojant kitas p ar n sritis, reikia atsižvelgti į jau suformuotų p-n sandūrų postūmį.

Švitinant Rentgeno spinduliuote kristalą, priemaišos į puslaidininkį galėtų būti įterpiamos kelis mikrometrus per keletą sekundžių, taip pat nebekistų jau suformuotų p-n sričių ribos. Taigi,

šis metodas yra pranašesnis už priemaišų įterpimą į puslaidininkį veikiant aukšta temperatūra ir jį taikant būtų galima sutalpinti daugiau tranzistorių į tūrio vienetą.

**Problema:** vakansijų, priemaišų atomų difuzija į Si, vakansijų ir kitų taškinių defektų generacija, veikiant minkštajai Rentgeno spinduliuotei.

**Tikslas:** ištirti vakansijų, priemaišų atomų silicyje difuziją, vakansijų ir tarpmazginių atomų generaciją, veikiant minkštajai Rentgeno spinduliuotei.

**Uždaviniai:**

1. Atlikti mokslinės, dalykinės literatūros analizę.
2. Pateikti įvairius vakansijų koncentracijos ir jų difuzijos silicyje tyrimo metodus.
3. Remiantis eksperimentų matematine analize įrodyti, ištirti vakansijų ir priemaišų atomų difuziją į silicį.
4. Remiantis gautais rezultatais padaryti išvadas.

**Tyrimo metodai:**

- Mokslinės, dalykinės, literatūros analizė, indukcija, dedukcija.
- Kristalo laidumo matavimas, rengenografinis kristalų tyrimas, eksperimentų rezultatų matematinis apdorojimas.

# I. TEORINĖ DALIS

## 1.1. Silicis

Silicis yra 14-liktas Mendelejevo periodinės lentelės IV grupės elementas, taigi jo išoriniame sluoksnyje yra keturi elektronai. Silicio atominė konfigūracija tokia:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ . Grynojo silicio krūvininkų koncentracijos ir kiti parametrai nurodyti lentelėse (1 lentelė, 2 lentelė).

1 lentelė

Būsenų tankis laidumo juostoje ( $N_c$ )	Būsenų tankis valentinėje juostoje ( $N_v$ )	Grynojo silicio krūvininkų koncentracijos ( $n_i = p_i$ )
$2.78 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$9.84 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$

Šaltinis: Singh J. Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures. Cambridge, (2003)

2 lentelė

Draustinė juosta, eV		Judrumas, $\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$ (300 K)	
300 K	0 K	Elektronas	Skylutė
1.12	1.17	1500	450

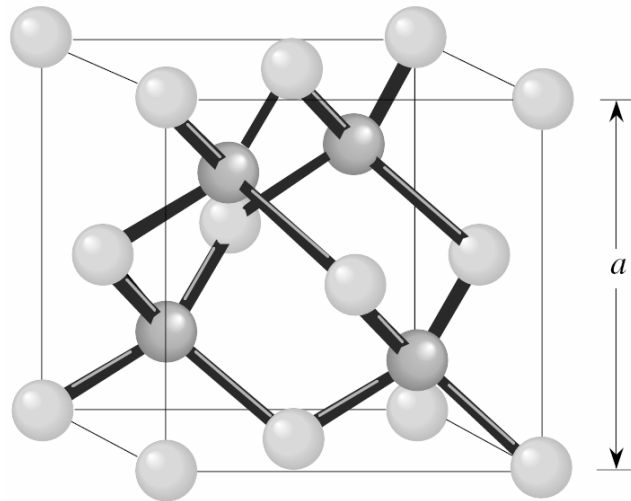
Šaltinis: Singh J. Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures. Cambridge, (2003)

Silicio (Si) Bravės gardelė (1.1 pav.) sudaryta iš dviejų centruotų paviršių kubinių gardelių, pasislinkusių vienas kitos atžvilgiu per  $\frac{1}{4}a$  erdvinės įstrižainės kryptimi. Čia  $a$  – gardelės konstanta. Tokios deimanto tipo silicio gardelės konstanta  $a = 5.431 \text{ \AA}$ , o tankis -  $2.329 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ .

Silicis yra puslaidininkis. Puslaidininkiuose 0 K temperatūroje, aukščiausia užimta juosta, valentinė juosta  $E_v$ , yra visiškai užimta elektronais, o kita aukštesnio lygmens juosta, laidumo juosta  $E_c$ , yra visiškai laisva (1.2 pav.). Atstumas tarp šių dviejų juostų vadinamas draustinės juostos  $\Delta E$  pločiu.

Metaluose aukščiausia užimta juosta 0 K temperatūroje yra tik dalinai užpildyta elektronais. Energijos skirtumas tarp vakuomo energijos ir aukščiausio elektronais užimtos energijos lygmens, Fermio lygmens, metale vadinamas elektronų išlaisvinimo iš metalo darbu

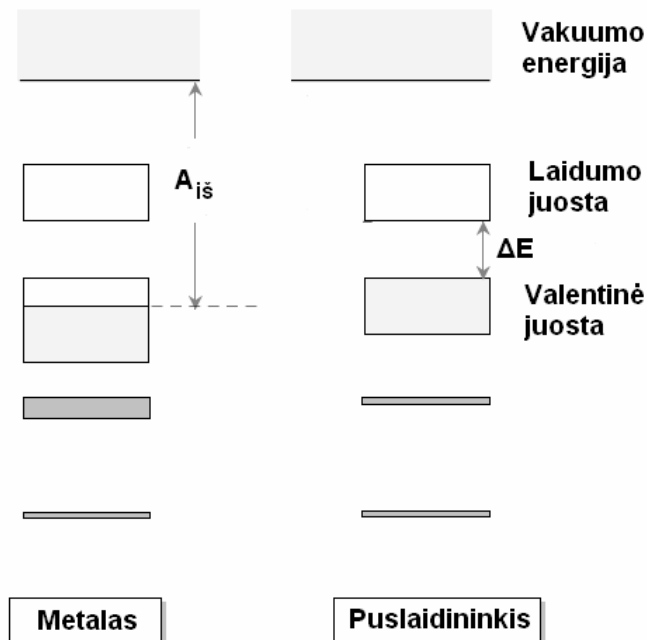
$A_{is}$ .



1.1 pav. Silicio (*Si*) Bravės gardelė

Šaltinis: Singh J. Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures. Cambridge, (2003)

Metalai turi labai didelį laidumą, kadangi labai daug elektronų gali dalyvauti srovės kūrime. Tačiau ir sunku keisti metalų laidumą. Puslaidininkių laidumas  $0\text{ K}$  temperatūroje lygus nuliui ir gana nedidelis laidumas baigtinėse temperatūrose (Ahrens, 1995), bet įmanoma keisti jų laidumo dydį net keletą eilių. Tai yra pagrindinė priežastis kodėl puslaidininkiai taip plačiai naudojami šiuolaikiniuose elektroniniuose prietaisuose.



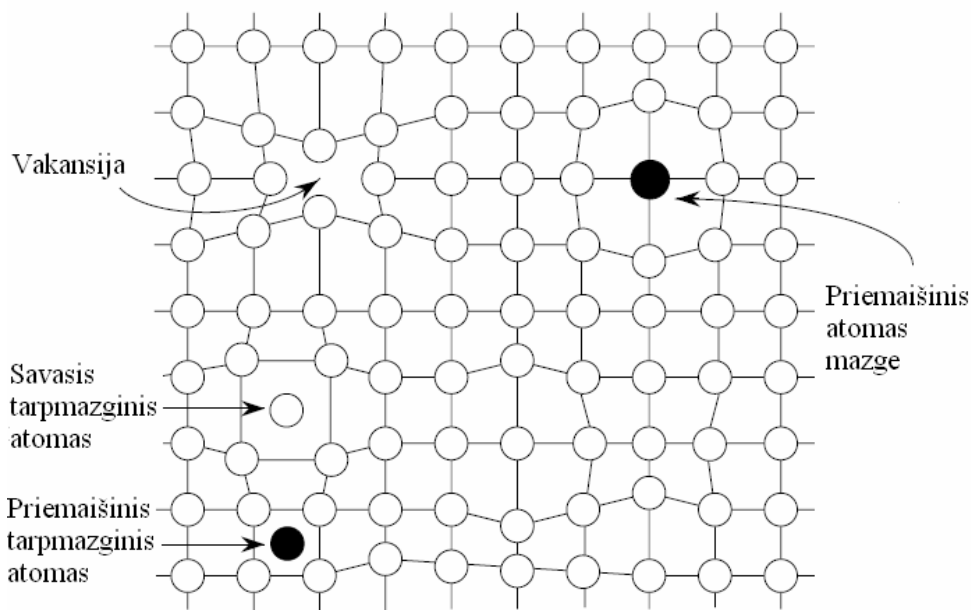
1.2 pav. Metalo ir puslaidininkio juostų užpildymas elektronais

Šaltinis: Singh J. Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures. Cambridge, (2003)

## 1.2. Taškiniai defektai silicio kristale

Bet kurie periodinės silicio kristalo struktūros nukrypimai, vadinami defektais (Ashcroft, 1976). Taškiniais defektais vadinami tokie, kurie iškraipo gardelės struktūrą vieno mazgo ribose, t.y. lokalizuoti tarpatominio atstumo  $a$  eilės dydžiu. Šie taškiniai defektai kardinaliai keičia silicio mechanines, elektrines, optines ir kitas charakteristikas. Akivaizdu, kuo grynesnis silicis, tuo ši įtaka ryškesnė. Šiuolaikinėmis technologijomis jau įmanoma išauginti šio puslaidininkio kristalus tik su  $10^{-8}$  % priemaišų koncentracija.

Savieji taškiniai defektai silicio kristale yra vakansija (vieta, mazgas, iš kurios išėjo atomas), ir tarpmazginis atomas (papildomas atomas, įsiterpęs į tarpmazgį) (1.3 pav.). Minėtieji taškiniai defektai literatūroje žymimi  $V$  ir  $I$  raidėmis, kurios atitinkamai reiškia anglų kalba terminus “vacancy” ir “interstitial”. Palikę savo vietas kristalo viduje, atomai gali judėti paviršiaus link ir, išėję į paviršių, atsidurti taisyklingos gardelės mazge. Kristale lieka tušti mazgai, kuriems nebegalima priskirti tam tikro įterptinio atomo. Tokie defektai vadinami Šotkio defektais. Frenkelio defektai – defektai, atsirandantys, kai vakansijos ir tarpmazginiai atomai tarpusavyje sudaro poras.



1.3 pav. Taškiniai defektai

Šaltinis: Singh J. Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures. Cambridge, (2003)

Įvedus priemaišos atomus į silicį, atsiranda dar kitų tipų taškiniai defektai. Jei priemaišos atomas atsiduria mazge, tai toks defektas vadinamas pakeitimo priemaiša, o jeigu tarpmazgyje – įterptine priemaiša (1.3 pav.).



Realus kristalas, esant temperatūrai  $T > 0$  K, visada turės nedidelę pusiausvyrą defektų koncentraciją, atitinkančią potencinės energijos minimumo sąlygą. Pusiausvyroji vakansijų santykinė koncentracija:

$$N_v = \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (1)$$

čia  $E_a$  – energija, reikalinga vienai vakansijai susidaryti,  $k$  – Bolcmano konstanta. Papildomi defektai silicyje atsiranda kaitinant, deformuojant, apspinduliuojant elektromagnetine ar korpuskuline spinduliuote. Minėti poveikiai, didinantys defektų koncentraciją, gali įvykti gaminant iš silicio detales elektroniniams prietaisams ar naudojant silicį naudojančius prietaisus. Taigi, labai svarbu ieškoti būdų kaip kontroliuoti šių defektų savybes kristaluose, tyrinėti defektų atsiradimo, persitvarkymo ir anihiliacijos procesus. Šiandien tai viena iš svarbiausių kietųjų kūnų fizikos užduočių.

Auginant silicio kristalus, dažnai priemaišos yra įvedamos specialiai. Toks procesas vadinamas legiravimu. Silicio legiravimo procesas auginant kristalą vyksta įvedant į lydinį, iš kurio formuojamas pavyzdėlis, būtiną priemaišos atomų kiekį. Tai daroma dviem tikslais: valdyti kristalo elektrinį laidumą ar rekombinacinius procesus. Siekiant pirmojo tikslo, būtina įvesti defektus, turinčius seklius lygmenis. *Si* puslaidininkiui donorinės priemaišos gali būti *P*, *As*, *Sb*, *Bi* atomai, o akceptorinės – *Be*, *Mg*, *Zn*, ir *Cd*. Siekiant kito tikslo, įterpiami priemaišos atomai, turintys gilius energetinius lygmenis. Jie atlieka efektyvų rekombinacinių centrų vaidmenį ir sumažina laiką, reikalingą pusiausvyrai įvykti, įvedant perteklinius elektronus ir skylutes. Tai būtina greitaveikiams puslaidininkiams prietaisams. Tokiais defektais gali būti sunkiųjų ir tauriųjų metalų atomai: *Fe*, *Ni*, *Cr*, *Cu*, *Ag*, *Au* ir kt.

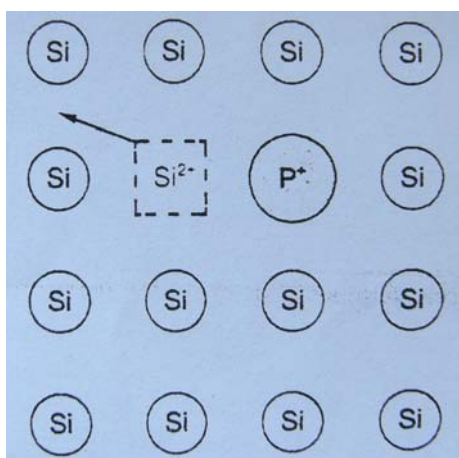
### 1.3. Vakansijų generavimas minkštais Rentgeno spinduliais

Silicyje taškinius defektus, vakansijas ir tarpmazginius atomus, galima generuoti, veikiant elektromagnetine spinduliuote, minkštaisiais Rentgeno spinduliais. Taigi, atsiranda Frenkelio pora. Paprastai egzistuoja vakansijos ir tarpmazginio atomo anihiliacijos energetinis barjeras, bet jis pakankamai mažas. Kita vertus, abi Frenkelio poros komponentės arba viena iš jų pakankamai judrios ir jos išsiskiria. Joms sąveikaujant su priemaišomis ir kitais struktūriniais defektais, susiformuoja stabilūs kompleksai, kurie ir apibūdina kristalo radiacinį sugadinimą.

Minkštieji Rentgeno spinduliai negali išmušti atomų iš gardelės mazgų tiesioginio susidūrimo metu, tačiau ši spinduliuotė gali sužadinti kristalo elektroninę sistemą. Tokiu būdu įvyksta atomų konfigūracinių kreivių  $U(Q)$  pasikeitimai, kurių metu energetinis barjeras sumažėja iki tiek, kad atomas gali pereiti iš mazgo į tarpmazgį arba metastabilią padėtį.

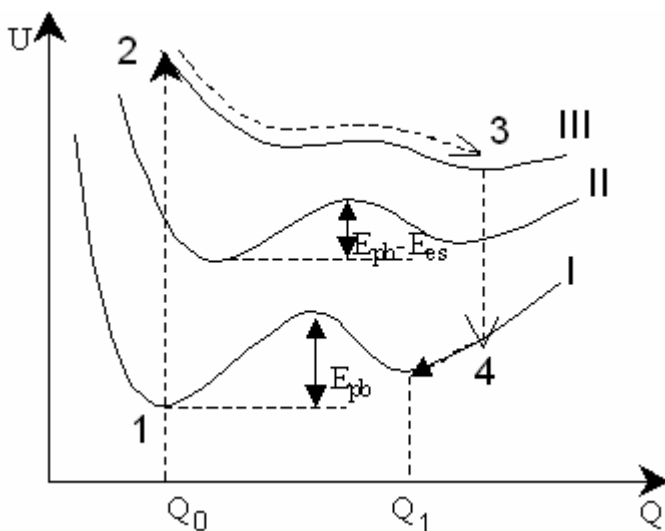
Taip samprotaujant, galima suformuluoti sąlygas, būtinas šio mechanizmo realizavimui. Visų pirma, elektroninis sužadinimas turi būti lokalizuotas iki mikroskopinių dydžių, kitaip tariant arti tiriamojo atomo. Puslaidininkiuose tai įmanoma atlikti pasitelkiant jau greta esamus defektus (sužadinant valentinius elektronus) arba pasinaudojant daugkartine gardelės atomo giluminių sluoksnių jonizacija. Antra, elektroninio sužadinimo gyvavimo periodas  $\tau_{es}$  turi būti ilgesnis nei laikas  $\tau_{pb}$ , reikalingas atomą perkelti iš gardelės mazgo į tarpmazgį. Pastarieji yra šiluminių kristalo svyravimų periodo ( $\sim 10^{-13}$  s) eilės. Galiausiai būtina, kad energija  $E_{es}$ , perduodama atomui, būtų pakankama žymiam tikimybės atomui ištrūkti iš mazgo padidėjimui, tai yra  $E_{es} \sim E_a$  (žr. 1 formulę). Ikislenkstinių defektų susidarymo klausimai aptariami 1954 metų literatūroje, pasiūlyti atitinkami modeliai, bet nuosekli teorija dar nesukurta. Visas siūlomas schemas galima suskirstyti į dvi klases priklausomai nuo mikroskopinių sričių, apibūdinančių defektų susidarymą: mechanizmai, paremti elektrostatiniu nestabilumu ir elektroninių svyravimų nestabilumu pasižymintys mechanizmai.

Elektrostatiniai defektų susidarymo mechanizmai realizuojami, kai tarpusavio ryšio energija tarp elektriškai įkrautos-sužadintos elektronų sistemos ir kitų krūvių, dipolių akivaizdžiai viršija kitas kristalo sąveikos energijas. Tokią mechanizmo veikimo schemą lengva suprasti nagrinėjant kovalentinį kristalą, silicį (1.4 pav.). Daug kartų jonizuojant gardelės atomą, esantį arti teigiamai įkrauto priemaišos atomo, dėka Kuloninių stūmos jėgų, silicio jonizuotas atomas yra išstumiamas iš mazgo ir susiformuoja Frenkelio pora. Reikia pažymėti, kad norint patenkinti sąlygą  $\tau_{es} > \tau_{pb}$ , būtina daugkartinė atomo vidinių elektronų sluoksnių jonizacija, nes atomo gyvavimo trukmė su dviem pašalintais valentiniais elektronais labai maža:  $\sim 10^{-16}$  s  $\ll \tau_{pb}$ .



1.4 pav. Defekto susidarymas silicyje, daug kartų jonizuojant gardelės atomą, esantį arti įkrauto donoro

Šaltinis: Кашкаров П.К. Образование точечных дефектов в полупроводниковых кристаллах. Москва, (1999)  
 Nagrinėjimą mechanizmą galima pavaizduoti atitinkama energetine konfigūracine diagrama (1.5 pav.).



1.5 pav. Konfigūracinė diagrama, paaiškinanti elektrostatinį defektų susidarymo mechanizmą.  
 Atominės konfigūracijos būsenos: I – pagrindinė, II – vienkartinės ir III – dvigubos jonizacijos

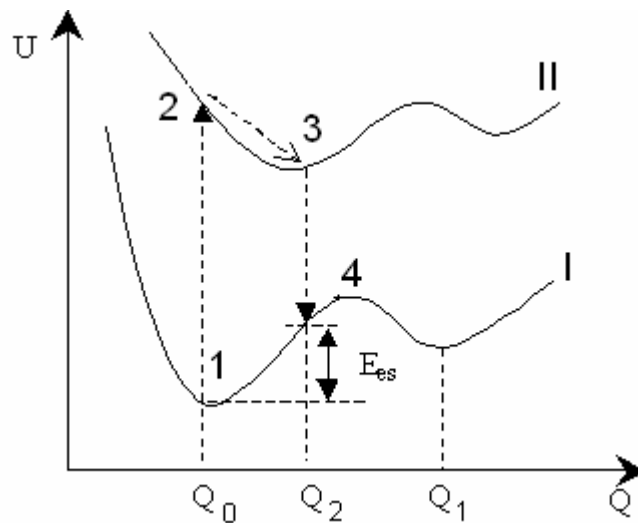
Šaltinis: Кашкаров П.К. Образование точечных дефектов в полупроводниковых кристаллах. Москва, (1999)  
 Įvykus atomo dvigubai jonizacijai (procesas 1 – 2), konfigūracija apibūdinama III kreive ir tada atomo perėjimas į tarpmazgį įvyksta be barjero (procesas 2 – 3). Paskui panaikinus elektroninį sužadimą (procesas 3 – 4), atominė konfigūracija pereina į defektinę būseną. Defektų susidarymo greitis proporcingas formulei:

$$\frac{dN_d}{dt} \sim \exp\left(-\frac{\tau_{pb}}{\tau_{es}}\right) \exp\left(-\frac{E_{pb} - E_{es}}{kT}\right), \quad (2)$$

kur  $E_{es} = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r}$  – donorinio atomo ( $q_1$ ) ir jonizuoto atomo ( $q_2$ ) kuloninės stūmos energija,

$E_{pb}$  – energetinis barjeras pereinant į defektinę būseną. Tenkinant sąlygą  $E_{pb} - E_{es} \leq 0$ , defektas susidaro be temperatūrinių fliktuacijų poveikio.

Generuojant defektus elektroninių virpesių mechanizmu, elektrinis sužadimas transformuojasi į stiprų virpamąjį sužadinimą mikroskopinėje atomo konfigūracijoje, t.y. kaip į stiprų lokalų kaitinimą. Tokie procesai puslaidininkiuose vyksta, kai krūvio nešėjai, sąveikaudami su defektais, turinčiais gilius energetinius lygmenis, rekombinacijos metu nieko neišspinduliuoja. Paaiškinti elektroninių virpesių mechanizmo detales galima peržiūrėjus konfigūracinę diagramą tam tikrai atominei konfigūracijai, jungiančiai neradiacinės rekombinacijos centrą (1.6 pav.).



1.6 pav. Konfigūracinė diagrama, iliustruojanti elektroninių svyravimų defektų susidarymo mechanizmą. Atominės konfigūracijos būsenos: I – pagrindinė, II – elektriškai sužadinta

Šaltinis: Кашкаров П.К. Образование точечных дефектов в полупроводниковых кристаллах. Москва, (1999)  
 Elektrono prisijungimas iš puslaidininkio laidumo juostos į nurodytą centrą atitinka perėjimą nuo kreivės I prie kreivės II (procesas 1 – 2) ir konfigūracinės padėties pasikeitimą į koordinatę  $Q_2$ . Po to kitas skylutės užgrobimas (procesas 3 – 4) atitinka potencialą I, bet tada atominė sistema atsiduria virpamai sužadintoje būsenoje. Papildoma energija, įveikti potencialinį barjerą  $E_{pb}$  ir pereiti į atominės konfigūracijos būseną su koordinatę  $Q_1$ , gali būti perduota pasitelkiant šiluminės fliktuacijas. Esant  $E_{pb} - E_{es} \leq 0$  procesas vyksta nepriklausomai nuo temperatūros. Defektų generacijos greitis proporcingas formulei:

$$\frac{dN_d}{dt} \sim R \exp\left(-\frac{E_{pb} - E_{sb}}{kT}\right), \quad (3)$$

kur  $R$  – nepusiausvyrų krūvininkų rekombinacijos sparta.

## 1.4. Elektriniai taškinių defektų tyrimo metodai

Minkštuosius Rentgeno spindulius galima naudoti generuojant vakansijas *Si* kristalo paviršiuje. Vieną kart ir du kart neigiamos vakansijos elgiasi kaip vieną kart ir du kart užkrauti akceptoriai (Matare, 1971), o teigiamos vakansijos elgiasi kaip donoriai (Matare). Šios vakansijos didina pavyzdėlio laidumą. Pavyzdėlio laidumas bus tuo didesnis, kuo į didesnę gylį įsiskverbs, kuo didesniame tūryje pasklis šios vakansijos. Galima išreikšti (Janavičius, 1997) vakansijų įsiskverbimo gylio  $x$  priklausomybę nuo laiko  $t$ :

$$x = 1.615\sqrt{D_v t}, \quad (4)$$

čia  $D_v$  – vakansijų difuzijos koeficientas. Vakansijų difuzijos koeficientas apskaičiuojamas pagal formulę (Van Vechten, 1974):

$$D_v = D_0 e^{\frac{-\Delta H_m}{kT}}. \quad (5)$$

Čia  $D_0$  yra priešeksponentinis daugiklis ir  $\Delta H_m$  yra entalpija arba vakansijų migracijos energija.

Matuojant puslaidininkio elektrinį laidumą  $R^{-1}$  ominiais planariniais kontaktais, uždėtais ant pavyzdėlio vienos paviršiaus pusės, o kitą paviršiaus pusę apšvitinus minkštąja Rentgeno spinduliuote, pastebimas elektrinio laidumo didėjimas bėgant laikui. Iš priklausomybės  $R^{-1}(\sqrt{t})$  galima nustatyti pavyzdėlio įsisotinimo vakansijomis laikus  $t_s$ .

Savitasis silicio, legiruoto boru, laidumas išreiškiamas lygtimi:

$$\sigma_1 = p_1 e \mu_p, \quad (6)$$

čia  $p_1$  – skylių koncentracija,  $\mu_p$  – skylių judrumas. Tai pačiai temperatūrai, bet jau kitai skylių koncentracijai:

$$\sigma_2 = p_2 e \mu_p. \quad (7)$$

Tada žinant savitąjį silicio laidumą  $\sigma_1 = 0.01 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$  (Dargys, 1994) ir skylių koncentraciją  $p_1 = 3.1 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-3}$  (Dargys) kambario temperatūroje ( $T = 300 \text{ K}$ ), neapspinduliuoto pavyzdėlio laidumą  $R_0^{-1}$  ir skerspjūvio plotą  $S$ , ilgį  $l$ , naudojant (6) ir (7) lygtis, randama skylių koncentracija:

$$p_2 = \frac{R_0^{-1} l p_1}{S \sigma_1}. \quad (8)$$

Pirmiausia visame pavyzdėlio tūryje pasklinda judriausios, vieną kart neigiamai užkrautos vakansijos (Bubenikov, 1989). Tarkime, po tam tikro kristalo švitinimo minkštąja Rentgeno spinduliuote laiko  $t_{s1}$ , visame pavyzdėlio tūryje pasklinda judriausios, vieną kart neigiamai

užkrautos vakansijos. Per laiką  $t_{s1}$  dalinai pasklinda ir du kart neigiamai užkrautos vakansijos. Savitojo laidumo padidėjimas  $\Delta\sigma_2$  po laiko  $t_{s1}$  yra proporcingas papildomai skylių, sukurtų vieną kart  $\Delta p_-^s$  ir du kart  $\Delta p_{--}$  neigiamai užkrautų vakansijų, koncentracijai. Dar po ilgesnio pavyzdėlio švitinimo minkštąja Rentgeno spinduliuote laiko  $t_{s2}$ , visame pavyzdėlio tūryje jau pasklinda ir vieną kart ir du kart neigiamai užkrautos vakansijos. Savitojo laidumo padidėjimas  $\Delta\sigma^s$  po laiko  $t_{s2}$  yra proporcingas papildomai skylių, sukurtų vieną kart  $\Delta p_-^s$  ir du kart  $\Delta p_{--}^s$  neigiamai užkrautų vakansijų, koncentracijai. Remiantis tuo, kas pasakyta, galima parašyti:

$$\frac{\Delta\sigma_2}{\Delta\sigma^s} = \frac{\Delta p_-^s + \Delta p_{--}}{\Delta p_-^s + \Delta p_{--}^s}. \quad (9)$$

Remiantis (7) ir (8) lygtimis ir iš eksperimento rezultatų sužinoję pradinę  $R_0^{-1}$ , po laiko  $t_{s1}$  laidumo vertę  $R_{s1}^{-1}$  ir po laiko  $t_{s2}$  laidumo vertę  $R_{s2}^{-1}$ , gauname:

$$\Delta p_-^s + \Delta p_{--} = \frac{(R_{s1}^{-1} - R_0^{-1})l p_1}{S \sigma_1}, \quad (10)$$

$$\Delta p_-^s + \Delta p_{--}^s = \frac{(R_{s2}^{-1} - R_0^{-1})l p_1}{S \sigma_1}. \quad (11)$$

Atsisžvelgus į (4) lygtį, galima rasti  $\Delta p_{--}$  ir  $\Delta p_{--}^s$  santykį:

$$\frac{\Delta p_{--}}{\Delta p_{--}^s} = \left( \frac{t_{s1}}{t_{s2}} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (12)$$

Išsprendus lygčių sistemą (10), (11) ir (12), randama, kad vieną kart ir du kart neigiamai užkrautų vakansijų sukurtų skylių koncentracijos po laiko  $t_{s2}$ :

$$\Delta p_-^s = \frac{(R_{s2}^{-1} - R_0^{-1})l p_1}{S \sigma_1} - \frac{(R_{s2}^{-1} - R_{s1}^{-1})l p_1}{S \sigma_1 \left( 1 - \left( \frac{t_{s1}}{t_{s2}} \right)^{\frac{1}{2}} \right)}, \quad (13)$$

$$\Delta p_{--}^s = \frac{(R_{s2}^{-1} - R_{s1}^{-1})l p_1}{S \sigma_1 \left( 1 - \left( \frac{t_{s1}}{t_{s2}} \right)^{\frac{1}{2}} \right)}. \quad (14)$$

Vieną kart neigiamai užkrautų vakansijų koncentracija  $\Delta n_- = \Delta p_-^s$ , o du kart –  $\Delta n_{--} = \frac{\Delta p_{--}^s}{2}$ .

Dabar žinant  $\Delta p_-^s$ ,  $\Delta p_{--}^s$  ir pavyzdėlio tūrį  $V = Sl$ , galima rasti minkštąją Rentgeno spinduliuote silicio pavyzdėlyje generuotų vieną kart ir du kart neigiamai užkrautų vakansijų skaičius:

$$\Delta N_- = \Delta p_-^s V, \quad (15)$$

$$\Delta N_{--} = \frac{\Delta p_{--}^s}{2} V. \quad (16)$$

Taikant (4) formulę, randamos vieną kart ir du kart neigiamai užkrautų vakansijų difuzijos koeficientų vertės:

$$D_- = \frac{l^2}{1.615^2 t_{s1}}, \quad (17)$$

$$D_{--} = \frac{l^2}{1.615^2 t_{s2}}. \quad (18)$$

Čia  $l$  – silicio pavyzdėlio storis.

Mokslininkai R. Purlys, A.J. Janavičius ir kt. (Purlys, 2001) atliko eksperimentus ir skaičiavimus pagal šiame skyrelyje aprašytą principą. Neigiamų, teigiamų, neutralių vakansijų ir tarpmazginių atomų generacijai silicio pavyzdėlyje buvo naudotas Rentgeno vamzdis (DRON-2) su variniu anodu. Naudotas  $p$ -tipo boru legiruotas  $Si$  kristalas, kurio parametrai tokie: Holo judrumas  $\mu_{0H} = (237 \pm 5) \frac{cm^2}{Vs}$ , skylių koncentracija  $p_0 = 4 \cdot 10^{13} cm^{-3}$ , savitasis laidumas  $\sigma_0 = 1.51 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1} cm^{-1}$ , matmenys  $3.33 \times 3.06 \times 3.09 mm^3$ . Pavyzdėlis buvo spinduliuojamas iš paviršiaus  $3.33 \times 3.06 mm^3$  minkštaisiais Rentgeno spinduliais ( $\lambda \geq 1.7 \cdot 10^{-10} m$ ).

Atlikus eksperimentus ir pagal jų rezultatus atlikus skaičiavimus, buvo gauta, kad Rentgeno spindulių generuotų, vieną kart neigiamai užkrautų vakansijų koncentracija  $\Delta n_- = 0.286 \cdot 10^{13} cm^{-3}$  ir difuzijos koeficientas  $D_- = 3.05 \cdot 10^{-6} \frac{cm^2}{s}$ , o du kart neigiamai užkrautų vakansijų koncentracija  $\Delta n_{--} = 0.270 \cdot 10^{13} cm^{-3}$  ir difuzijos koeficientas  $D_{--} = 1.47 \cdot 10^{-6} \frac{cm^2}{s}$ .

Tokios didelės vakansijų difuzijos koeficientų vertės neapsinduliuotame silicyje taptų esant apie 800 K temperatūrai (Van Vechten, 1974).

Remiantis šiais rezultatais galima padaryti išvadą, kad apspinduliuotas pavyzdėlis yra tam tikroje sužadintoje būsenoje, kurios fizikinės savybės kitokios.



## 1.5. Brego atspindžio taikymas gardelės defektų analizei

Sutrikdžius atomų išsidėstymo gardelėje periodiškumą, pakinta interferencinių difrakcinio spektro smailių intensyvumas. Šio efekto aprašymui į suminę intensyvumo sklaidos formulę įvedamas daugiklis  $e^{-2M}$ , kuris vadinamas Debajaus-Volerio faktoriumi (Финкель, 1971):

$$I = I_0 \cdot e^{-2M} + I_{TDF}, \quad (19)$$

čia  $I_{TDF}$  – difuzinio fono intensyvumas,  $I_0$  – difrakcinio spektro maksimumo intensyvumas pradiniu laiko momentu. Kadangi difuzinio fono intensyvumas monokristalų suminiam intensyvumui turi nežymią įtaką, tai tolimesniuose skaičiavimuose šį narį atmesime.

Rodiklis  $M$  susijęs su gardelės mazgų nuokrypiu nuo pusiausvyros padėties:

$$2M = 16\pi^2 \overline{u_s^2} \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}, \quad (20)$$

čia  $\overline{u_s^2}$  – vidutinė kvadratinė gardelės mazgų nuokrypa nuo jų idealiųjų padėčių struktūroje atspindžio plokštumų ( $hkl$ ) normalės kryptimi,  $\theta$  – difrakcijos kampas,  $\lambda$  – Rentgeno spinduliuotės bangos ilgis.

[vertinus silicio kristalo izotropiškumą:

$$\overline{u_s^2} = \frac{1}{3} \overline{u^2}. \quad (21)$$

$\overline{u^2}$  – vidutinė kvadratinė nuokrypa bet kuria kryptimi.

Tada (20) formulę galima perrašyti:

$$2M = \frac{16}{3} \pi^2 \overline{u^2} \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}. \quad (22)$$

Bendru atveju, esant bet kuriai bandinio temperatūrai, kristalo gardelės mazgai bus išvesti iš pusiausvyros padėties tiek dėl šiluminio judėjimo, tiek dėl tam tikro kiekio struktūros defektų. Todėl:

$$\overline{u^2} = \overline{u_{din}^2} + \overline{u_{stat}^2}. \quad (23)$$

Mūsų atveju, dėl Rentgeno spinduliuotės poveikio susidarys papildomas skaičius defektų. Tai padidins vidutinę kvadratinę nuokrypą dydžiu  $\Delta \overline{u_{stX}^2}$ . Švitinimo metu suminis  $\overline{u^2}$  didės, nes didės Rentgeno spinduliuotės sąlygotas  $\Delta \overline{u_{stX}^2}$ :

$$\overline{u^2} = \overline{u_{din}^2} + \overline{u_{stat}^2} + \Delta \overline{u_{stX}^2} \quad (24)$$

Kadangi mus domina tik Rentgeno spinduliuotės sąlygotas  $\overline{\Delta u_{stX}^2}$ , tai  $\overline{u_{din}^2}$  ir  $\overline{u_{stat}^2}$  nepaisome ir tada gauname, kad

$$\overline{\Delta u_{stX}^2} = \frac{3}{16\pi^2} \ln \frac{I_0}{I} \frac{1}{\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right)^2} \quad (25)$$

ir

$$\sqrt{\overline{\Delta u_{stX}^2}} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \left(\ln \frac{I_0}{I}\right)^{1/2} \frac{\lambda}{\sin \theta}. \quad (26)$$

Kadangi iš Vulfo-Brego lygties (Kittel, 1996)

$$\frac{\sin \theta}{\lambda} = \frac{1}{2d}, \quad (27)$$

tai (26) formulę galima perrašyti

$$\sqrt{\overline{\Delta u_{stX}^2}} = \frac{\sqrt{3}d}{2\pi} \left(\ln \frac{I_0}{I}\right)^{1/2}. \quad (28)$$

Čia  $d$  – gardelės tarpplokštuminis atstumas.

## 1.6. Brego atspindys ir difuzinė sklaida

Brego difrakcija yra svarbus įrankis, vystant efektyvius, gardelės struktūrą nežalojančius metodus, tiriančius plonų paviršinių kristalo sluoksnių būdingus struktūros defektus (Афанасьев, 1986). Nepaisant egzistavusios nuomonės, kad Brego difrakcinių maksimumų intensyvumų matavimu paremti metodai, tiriantys struktūros defektus, yra mažo jautrumo (Пинскер, 1982), vėlesniu metu atkreiptas žymus dėmesys Rentgeno spindulių sklaidos tyrimams.

Mokslininkų susidomėjimo, Brego atspindžio taikymu nurodytiems tikslams, pagyvėjimas įvyko dėl straipsnyje (Entin, 1991) paskelbtų rezultatų, kurie atskleidė, kad naudojant trumpabangę elektromagnetinę spinduliuotę, pasiekiamas didelis jautrumas Brego atspindžio metodu tiriant kristalo struktūros defektus. Dar vėliau buvo atskleista, kad suminis integralinis atspindys (total integrated reflectivity (TIR)) didėja didėjant kristalo iškraipymo laipsniui, sukeltam dėka difuzijos chaotiškai pasklindant defektams. Šios difuzijos įtaka darosi pastebimai žymi jau nuo  $t \geq \Lambda$  ( $t = \frac{1}{\mu_0}$ ,  $\mu_0$  yra normalusis fotoelektrinės absorbcijos

koeficientas,  $\Lambda = \frac{\lambda \cdot \sin \vartheta}{|\chi_h| \cdot C}$  – ekstinkcijos ilgis).

Suminio integralinio atspindžio ir jo komponentų analitiniai skaičiavimai buvo pateikti naudojant Brego difrakcijos teoriją (Молодкин, 1997) pritaikytą tolygiai pasiskirsčiusiems klusteriams. Iškraipymų laipsnis ir jo įtaka sklaidos pobūdžiui buvo sumodeliuoti įvedant į idealaus kristalo formulę (Пинске, 1982) struktūrinio tobulumo žinomus parametrus, t.y. Debajaus-Volerio statinio faktoriaus eksponentę  $L$ , ekstinkcijos koeficientus koherentinei  $\mu_{ds}$  ir difuzinei  $\mu^*$  intensyvumo komponentėms. Suminis integralinis atspindys realiam kristalui Brego difrakcijos atveju yra žinomas kaip dviejų dalių, t.y. Brego (koherentinės)  $R_{iB}$  komponentės ir difuzinės (nekoherentinės)  $R_{iD}$  komponentės, suma:

$$R_i = R_{iB} + R_{iD} = R_{i0} \cdot E + (1 - E^2) \cdot R_{iK}, \quad (29)$$

čia  $R_{i0}$ ,  $R_{iK}$  – atitinkamai idealaus ir idealaus-mosaikinio kristalų integralinis atspindys (integral reflectivity (IR)),  $E = \exp(-L)$  yra statinis Debajaus-Volerio faktorius. Minėtų struktūrinio tobulumo parametrų ( $L, \mu_{ds}, \mu^*$ ) vertės gali būti varijuojamos gana plačiame intervale ( $0 < L < 1$ ,  $\mu_{ds}, \mu^*$  iki  $0.3 \mu_0$ ). Taip pat analizuojamos komponentių  $R_{iB}$  ir  $R_{iD}$  priklausomybės nuo krintančios spinduliuotės energijos ir iškraipymo laipsnio, kad suprasti jų indėlį į  $R_i$ .

Teoriniai (Lang, 1979) ir eksperimentiniai (Мачулин, 1995) tyrimai parodė, kad, analizuojant išsklaidyto spindulio intensyvumo erdvinio pasiskirstymo profilį  $I(x)$ , gaunama patikima informacija apie kristalų struktūrinio tobulumo laipsnį.

Spindulio, išsklaidyto atsispindint nuo idealaus kristalo paviršiaus, intensyvumo erdvinio pasiskirstymo profilio išraiška (Lang, 1979):

$$I_B(x) = \frac{(I_0 \cdot Q \cdot s)}{\sin(2 \cdot \vartheta)} \cdot \frac{J_1^2(\alpha \cdot x)}{(\alpha \cdot x/2)^2} \cdot \exp(-\mu_0 \cdot x/\cos \vartheta). \quad (30)$$

Čia  $I_0$  – pirminio spindulio intensyvumas,  $Q = \frac{\pi^2 \cdot d \cdot \cos \vartheta}{\Lambda^2}$ ,  $\Lambda = \frac{\lambda \cdot \sin \vartheta}{C \cdot |\chi_h|}$  yra ekstincijos ilgis,

$d = \frac{\lambda}{2 \cdot \sin \vartheta}$ ,  $J_1(\alpha \cdot x)$  – pirmos eilės Beselio funkcija,  $\alpha = \frac{C \cdot K \cdot |\chi_h|}{2 \cdot \cos \vartheta}$ ,  $K = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda}$ ,  $\vartheta$  – Brego kampas,  $s$  – detektoriaus plyšio plotis.

Realiame kristale koherentinės komponentės (30) mažėjimas įvyksta dėl intensyvumo perėjimo, apibūdinamo koeficientu  $\exp(-\mu_{ds} \cdot x/\cos \vartheta)$ , į difuzinės dedamosios sąskaitą.

Difuzinės komponentės intensyvumas (Гаврилов, 1992) išreiškiamas taip:

$$I_D(x) = I_0 \cdot R_{iD}^{kin}(x) \cdot \Pi(x), \quad (31)$$

čia  $R_{iD}^{kin}(x) = \frac{Q \cdot s}{\sin 2\vartheta} \cdot \frac{(1 - E^2)}{E^2}$  ir  $\Pi(x) = \exp[-(\mu_0 + \mu^*) \cdot x]$ .

Taigi, atspindėto spindulio suminio intensyvumo pasiskirstymas kristaluose su defektais gali būti išreikštas:

$$I(x) = I_B(x) + I_D(x). \quad (32)$$

Išsklaidyto spindulio intensyvumo erdvinio pasiskirstymo profilio analizei gauti atliekami skaičiavimai, naudojant formules (30-32) ir Takagi-Topin (TT) lygtis (Takagi, 1969). Šiuo atveju kristalo iškraipymo laipsnis gali būti lengvai varijuojamas. Trumpabangės spinduliuotės ( $\lambda_s \ll \Lambda$ ) atvejis, modeliuojant kristalo struktūrinius iškraipymus ir jų įtaką Rentgeno spindulių sklaidai, labiausiai atitinka tolygiai pasiskirsčiusius gardelės defektus. Gardelės iškraipimų laipsnis charakterizuojamas bedimensiniu parametru  $HW$  ( $H = 1/d$  yra atvirkštinės gardelės vektorius,  $W$  – amplitudė). Ši reikšmė paprastai varijuojama nuo 0 iki 2.

Lentelėje (3 lentelė) pateikti  $R_i$ ,  $R_{i0}$ ,  $R_{iK}$  ir realių kristalų  $R_{i1}$  ( $L = 0.05$ ),  $R_{i2}$  ( $L = 0.1$ ),  $R_{i3}$  ( $L = 0.1$ ,  $\mu_{ds} = 0.3 \mu_0$ ) priklausomybės nuo išsklaidytosios spinduliuotės bangos ilgio  $\lambda$  skaičiavimų rezultatai, gauti naudojant formulę (29). Kuo didesnė parametro  $L$  vertė, tuo didesnė realaus kristalo suminio integralinio atspindžio vertė.

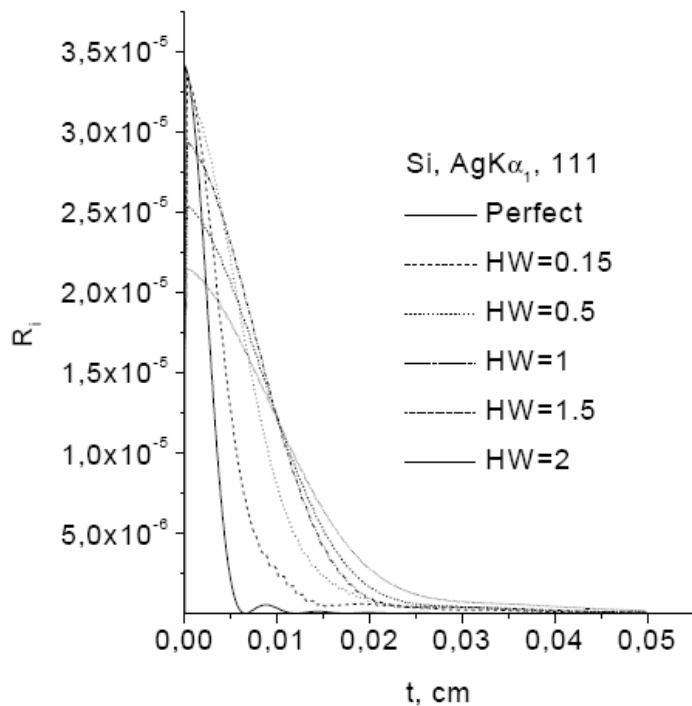
**Suminio integralinio atspindžio vertės įvairiems bangų ilgiams  $\lambda$  silicio kristaluose su įvairiais struktūrinio tobulumo laipsniais**

$\lambda, \text{Å}$	$R_{i0} \times 10^5$	$R_{i1} \times 10^5,$ $\Delta R = R_{i1} - R_{i0}$ $\times 10^5$	$R_{i2} \times 10^5,$ $\Delta R = R_{i2} - R_{i0}$ $\times 10^5$	$R_{i3} \times 10^5,$ $\Delta R = R_{i3} - R_{i0}$ $\times 10^5$	$R_{iK} \times 10^4,$ $\Delta R = R_{iK} - R_{i0}$ $\times 10^4$
0.5593	1.49	1.74	1.95	1.94	7.49
		0.26	0.46	0.45	7.341
0.709	1.88	2.12	2.33	2.31	6.09
		0.24	0.45	0.43	5.902
1.54	3.88	4.01	4.11	3.985	2.8
		0.13	0.23	0.1	2.412
1.93	4.75	4.82	4.87	4.65	2.3
		0.07	0.12	-0.1	1.825

Šie rezultatai neprieštarauja Rentgeno spindulių išsklaidymo eksperimentiniams rezultatams, gautiems įvairių autorių.

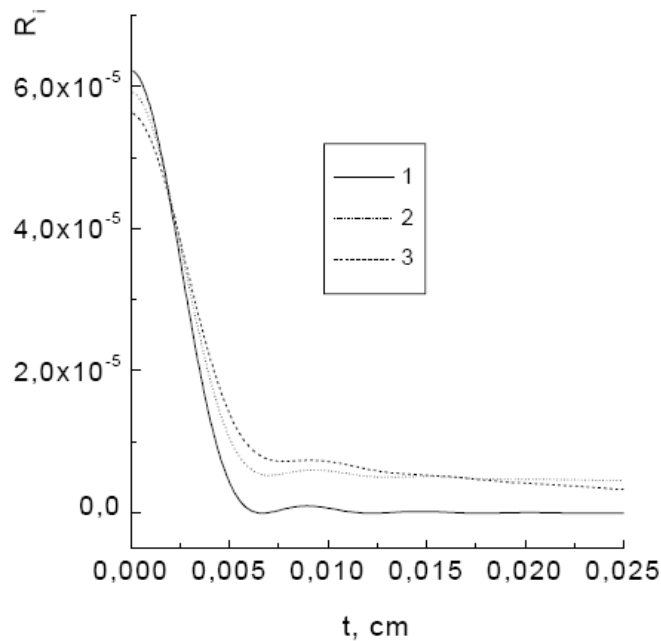
Svarbu pažymėti, kad ilgabangei spinduliuotei, esant tam tikram kristalo iškraipymo laipsniui, charakterizuojamam parametru  $L$ , vietoj suminio integralinio atspindžio didėjimo gali įvykti ir jo mažėjimas. Tai reiškia, kad energijos priklausomybė  $R_i = f(\lambda)$  plačiame bangų ilgių intervale nėra monotonišė. Ši ypatybė pasireiškia esant didelėms statinio faktoriaus vertėms, kada suminio integralinio atspindžio žinomos analitinės išraiškos reikalauja papildomos analizės (Барьяхтар, 1989). Atlikti skaičiavimai taip pat parodė, kad trumpabangių Rentgeno spindulių intervalas labiausiai jautrus struktūriniais defektams, kadangi šiame intervale didžiausias skirtumas  $\Delta r = R_{iK} - R_{i0}$ .

Brego atspindžio erdvinio intensyvumo pasiskirstymai  $I(x)$ , apskaičiuoti taikant formulę (32), įvairiems struktūrinio tobulumo parametrų pavaizduoti 1.7 pav. ir 1.8 pav. Kaip matyti iš šių paveikslėlių, gardelės iškraipymo laipsnio padidėjimas sukelia pastebimą difuzinės sklaidos intensyvumo padidėjimą.



1.7 pav. Brego išsklaidytų spindulių erdvinio intensyvumo pasiskirstymų profiliai, apskaičiuoti naudojant skaitmeninius Takagi-Topin lygčių sprendinius, įvairioms parametro  $HW$  vertėms.

Rentgeno spinduliuotės šaltinis  $Ag K_{\alpha 1}$ . Atspindžio plokštuma (111)



1.8 pav. Brego išsklaidytų spindulių erdvinio intensyvumo pasiskirstymų profiliai, apskaičiuoti naudojant formules (30-32), įvairioms struktūrinio tobulumo parametro  $L$  vertėms: 1 – idealus kristalas; 2 – realus kristalas ( $L = 0.05$ ); realus kristalas ( $L = 0.1$ ,  $\mu_{ds} = 0.3 \cdot \mu_0$ ).

Rentgeno spinduliuotės šaltinis  $Ag K_{\alpha 1}$ . Atspindžio plokštuma (111)

## 1.7. Brego atspindžio taikymas vakansijų koncentracijai matuoti

Rentgeno spinduliuote paveiktame *Si* kristale, dėka Ožė efekto kristalo paviršiniame sluoksnyje sukuriama Frenkelio defektai ir metastabilios vakansijos. Po *Si* kristalo apšvitinimo minkštais Rentgeno spinduliais, labai greitai difunduojančios ir ilgai gyvuojančios (1.5 ÷ 24 val.) metastabilios neigiamos vakansijos kambario temperatūroje skverbdamosi gilyn į kristalą, keičia kristalo elektrinį laidumą, gardelės struktūrą (Janavičius, 2007). Aptikti rezonansinio tipo elektrinio laidumo ir gardelės parametrų kitimo reiškiniai susiję su Rentgeno spinduliais generuotais metastabiliais defektais. Atliktuose matavimuose buvo tiriama Brego trečios eilės atspindžio intensyvumų laikinė priklausomybė nuo *Si* (111) orientacijos kristalo, kurio matmenys  $0.017 \times 0.004 \times 0.004 \text{ m}^3$ . Difraktometru DRON-3 matuota Brego difrakcinio maksimumo intensyvumo (Nordlund, 1997) laikinė priklausomybė

$$\frac{I(t)}{I_0} = \exp\left(-\frac{16}{3}\pi^2(\langle u_i^2 \rangle + \langle u(t)_V^2 \rangle)\left(\frac{\sin \vartheta}{\lambda}\right)^2\right), \quad (33)$$

kai vidutiniai kvadratiniai atomų nuokrypiai  $\langle u(t)^2 \rangle$  susideda iš pradinių  $\langle u_i^2 \rangle$  ir nuo laiko priklausančių  $\langle u(t)_V^2 \rangle$ , susijusių su generuotomis metastabiliomis vakansijomis (Nordlund, 1997), tarpmazginiais atomais ir juos supančiais kaimyniniais atomais, nukrypusiais nuo idealios gardelės tvarkos, visumoje sudarančiais sferinio defekto gardelę – *SD* (Nordlund). Kadangi difuzinės sklaidos intensyvumas proporcingas defektų skaičiui, tai į *SD* galima žiūrėti kaip į tam tikrą difuzinės sklaidos tūrinį elementą, nusakomą sfera, kurios spindulys silicyje (Nordlund) yra 100-150  $\text{Å}$ . Brego difrakcinio maksimumo intensyvumas yra proporcingas atspindyje dalyvaujančių gardelės atomų skaičiaus kvadratui  $N_B^2$ . Tuomet laikydami, kad Brego atspindyje dalyvaujančių atomų skaičius kinta  $N_B(t) = N_{Bi} + \Delta_G N_{SD}(t)$  dėl spinduliuotės poveikio besiformuojančių sferinio defekto gardelių, kuriose dalyvaujančių atomų skaičius  $\Delta_G N_{SD}(t)$  gali būti išreikštas kaip sferinių defektų skaičiaus  $N_{SD}(t)$  ir atomų skaičiaus tokiam defekte  $\Delta_G$  sandauga. Tuomet iš (33) lygties gaunama:

$$\sqrt{\langle u(t)_V^2 \rangle} = \sqrt{\ln \frac{I_i}{I(t)} \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \frac{\lambda}{\sin \vartheta}}, \quad (34)$$

$$\frac{\Delta_G N_{SD}(t)}{N_{Bi}} = -\frac{8}{3}\pi^2 \langle u(t)_V^2 \rangle \left(\frac{\sin(\vartheta)}{\lambda}\right)^2. \quad (35)$$

Pasinaudojus matavimais ir (34), (35) lygtimis, kai žinomos vertės  $\lambda$  ir  $\mathcal{G}$ , gaunama vakansijų tankio priklausomybė nuo šaknies iš laiko  $N_V(\sqrt{t})$ .



## 1.8. Brego atspindžio taikymas vakansijų difuzijai tirti

Matuojant Brego difrakcinio spektro smailės intensyvumo priklausomybę nuo laiko, registruojami silicio kristalo gardelių plokštumų, tenkinančių Vulfo-Brego lygties maksimumo sąlygą, atspindėti elektromagnetinės spinduliuotės intensyvumai. Tačiau šios minėtos plokštumos yra skirtinguose silicio pavyzdėlio gyliuose, taigi ir nevienodai prisideda (dėl absorbcijos) prie registruojamo suminio visų plokštumų atspindėtos Rentgeno spinduliuotės intensyvumo.

Rentgeno spindulių intensyvumas silicio kristale mažėja eksponentiškai (Gauglitz, 2003):

$$I(x) = I_0 e^{-\mu(E)x}. \quad (36)$$

Čia  $I(x)$  – spindulių intensyvumas kristale, nuėjus atstumą  $x$ ,  $I_0$  – pradinis intensyvumas kristalo paviršiuje,  $\mu(E)$  – absorbcijos koeficientas, priklausantis nuo Rentgeno spindulių fotono energijos  $E$ . Absorbcijos koeficientas susijęs su fotoefekto skerspjūviu  $\sigma_f(E)$  tokia lygtimi (Strzalkowski, 1978):

$$\mu(E) = n_0 \sigma_f(E), \quad (37)$$

čia  $n_0$  – silicio atomų koncentracija vienetiniame tūryje. Fotoefekto skerspjūvis  $\sigma_f(E)$ :

$$\sigma_f(E) = \frac{C Z^k}{(\hbar \omega)^n} = \frac{C Z^k}{E^n}, \quad (38)$$

kur  $C = 1.728 \cdot 10^{-81} m^2 J^{3.5}$ ,  $k = 4$ ,  $n = 3.5$  (Purlys, 2001).  $Z$  – elektronų skaičius silicio atome. Taigi, remiantis (36), (37), (38) lygtimis ir atsižvelgus į difrakcijos kampo  $\theta$  vertę, kristalo gylis  $x$ , nuo kurio plokštumų atspindėtos pradinės Rentgeno spinduliuotės intensyvumas  $I_0$  sumažėja  $N$  kartų:

$$x = \frac{\ln\left(\frac{1}{N}\right)}{-\mu(E)} = \frac{\ln\left(\frac{1}{N}\right)}{-n_0 \sigma_f(E)} = \frac{\ln\left(\frac{1}{N}\right) E^n \sin \theta}{-n_0 C Z^k 2}. \quad (39)$$

Pritaikę (39) lygtį ne Rentgeno spinduliuotės fotono energijai  $E$ , o Rentgeno spinduliuotės bangos ilgiui  $\lambda$ , žinant, kad  $E = \frac{hc}{\lambda}$  ( $c$  – elektromagnetinių bangų greitis vakuume), gauname:

$$x = \frac{\ln\left(\frac{1}{N}\right) \left(\frac{hc}{\lambda}\right)^n \sin \theta}{-n_0 C Z^k 2}. \quad (40)$$

Remiantis (4) ir (40) lygtimis, galima rasti vakansijų difuzijos koeficientų vertes:

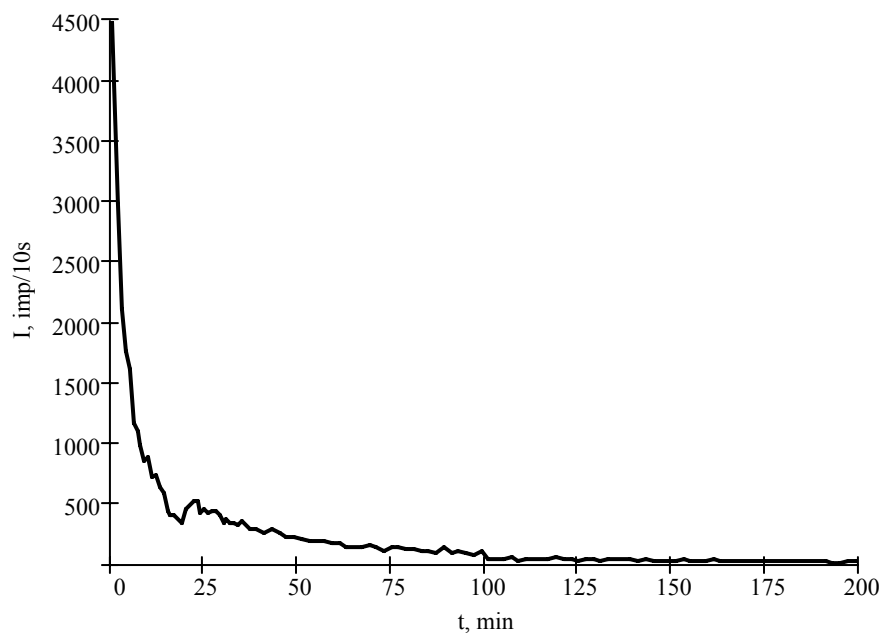
$$D_{vi} = \frac{\left( \ln\left(\frac{1}{N}\right) \left(\frac{hc}{\lambda}\right)^n \sin \theta \right)^2}{(-1.615n_0 C Z^k 2)^2 t_i}, \quad (41)$$

čia  $t_i$  – vidutinių kvadratinių nuokrypų silicio gardelėje priklausomybės nuo šaknies iš švitinimo laiko  $i$ -tosios tiesinės dalies pabaigos laikas.

## II. PRAKTINĖ DALIS

### 2.1. Eksperimentiniai rezultatai ir jų teorinis apibendrinimas

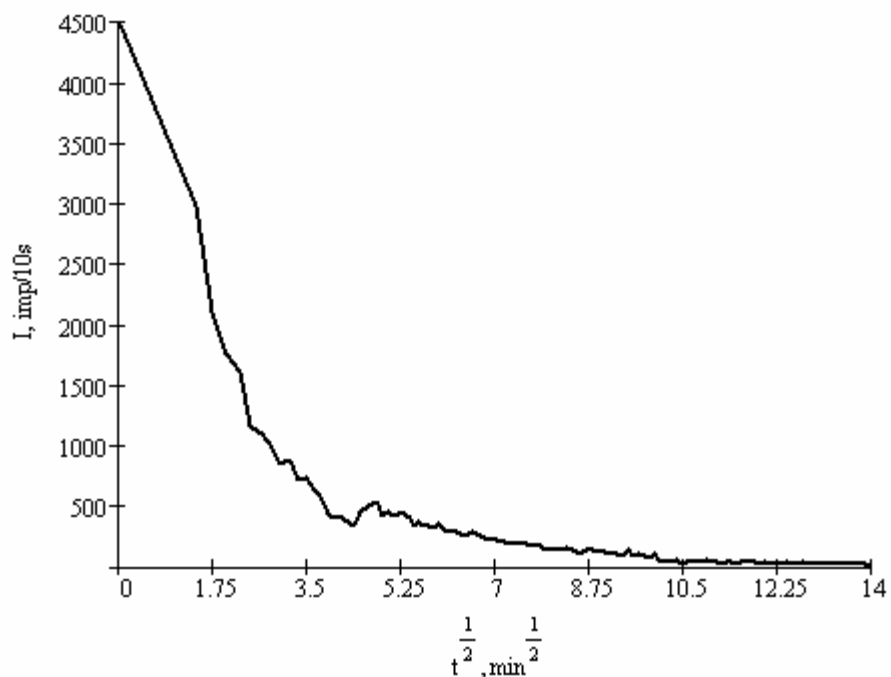
Pirmame atliktame eksperimente, silicio pavyzdėlis buvo švitinamas Rentgeno spinduliuote, esant 10 kV anodinei įtampai ir 23 mA anodinei srovei. Tuo pat metu buvo matuojama ir silicio difrakcinio spektro smailės intensyvumo priklausomybė nuo švitinimo laiko. Remiantis šiais matavimais, nubrėžti silicio difrakcinio spektro smailės intensyvumo priklausomybės nuo švitinimo laiko (2.1 pav.) ir nuo šaknies iš švitinimo laiko (2.2 pav.) grafikai.



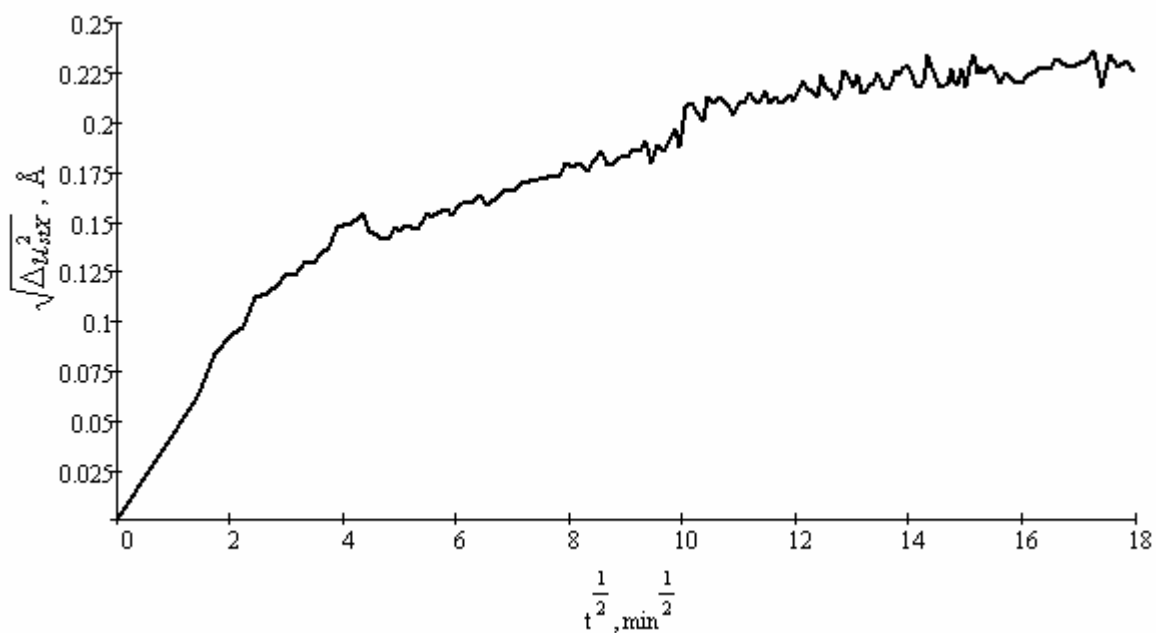
2.1 pav. Silicio difrakcinio spektro smailės intensyvumo priklausomybė nuo švitinimo laiko, kai  $U_a=10$  kV ir  $I_a=23$  mA

Naudojant formulę (26), galima apskaičiuoti vidutines kvadratinės nuokrypas  $\overline{\Delta u_{stX}^2}$ , sąlygotas dėl Rentgeno spinduliuotės poveikio susidariusių papildomo skaičiaus defektų (vakansijų). 2.3 pav. pateiktas vidutinių kvadratinių nuokrypų silicio gardelėje priklausomybės nuo šaknies iš švitinimo laiko grafikas, kuriame aiškiai matyti keturios tiesinės dalys. Tai rodo, kad švitinant Si pavyzdėlį Rentgeno spinduliuote, generuojamos keturių tipų vakansijos, kurios skverbiasi į kristalo tūrį. Remiantis R. Purlio ir kt. (2001) straipsniu, galima teigti, kad generuojamos vieną kart ir du kart neigiamos, teigiamos ir neutralios vakansijos. Kaip matyti iš vidutinių kvadratinių nuokrypų silicio gardelėje priklausomybės nuo šaknies iš švitinimo laiko (2.3 pav.), tiesinių dalių pabaigos laikai lygūs  $t_1 = 4$  min,  $t_2 = 20$  min,  $t_3 = 100$  min ir  $t_4 = 256$

min. Apskaičiavus pagal (40) formulę pavyzdėlio gylį  $x$ , kai  $N = 10$  ir difrakcijos kampas  $\theta = 47.49$ , galima remiantis (41) lygtimi įvertinti visų keturių tipų vakansijų difuzijos koeficientus.



2.2 pav. Silicio difrakcinio spektro smailės intensyvumo priklausomybė nuo šaknies iš švitinimo laiko, kai  $U_a = 10$  kV ir  $I_a = 23$  mA



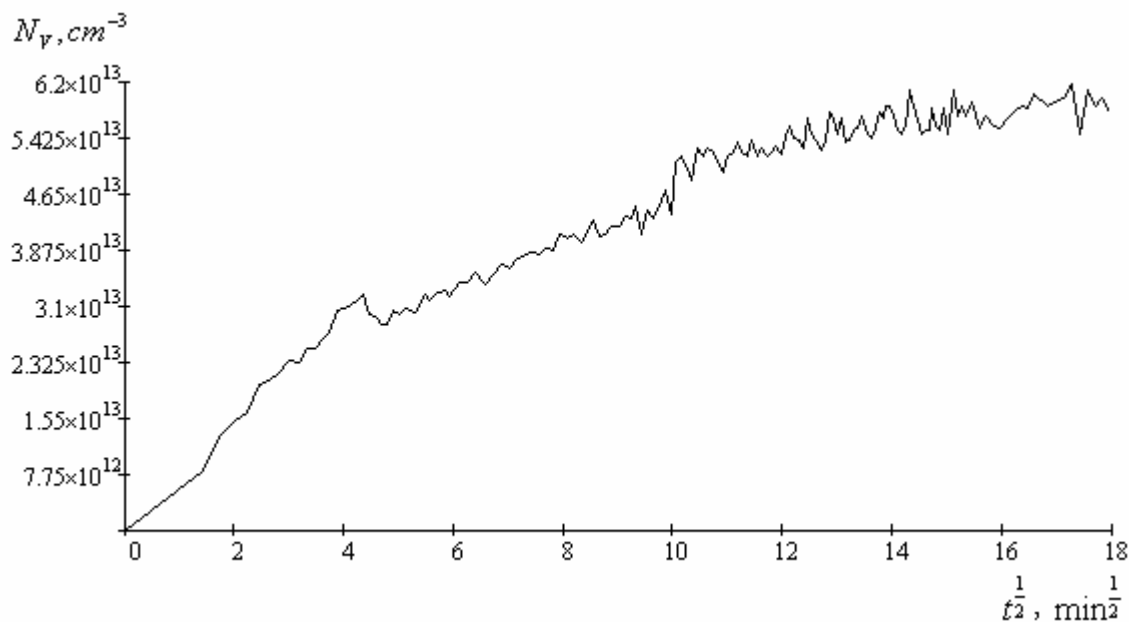
2.3 pav. Vidutinių kvadratinių nuokrypų silicio gardelėje priklausomybė nuo šaknies iš švitinimo laiko, kai  $U_a = 10$  kV ir  $I_a = 23$  mA

Gauta, kad pačių judriausių, vieną kart neigiamų vakansijų (Bubenikov, 1989) difuzijos koeficientas  $D_- = 6.24 \cdot 10^{-9} \frac{cm^2}{s}$ , mažiau judrių, du kart neigiamų vakansijų (Bubenikov) –

$D_{--} = 1.25 \cdot 10^{-9} \frac{cm^2}{s}$ , neutralių vakansijų –  $D_0 = 2.50 \cdot 10^{-10} \frac{cm^2}{s}$  ir teigiamų –

$D_+ = 9.74 \cdot 10^{-11} \frac{cm^2}{s}$ .

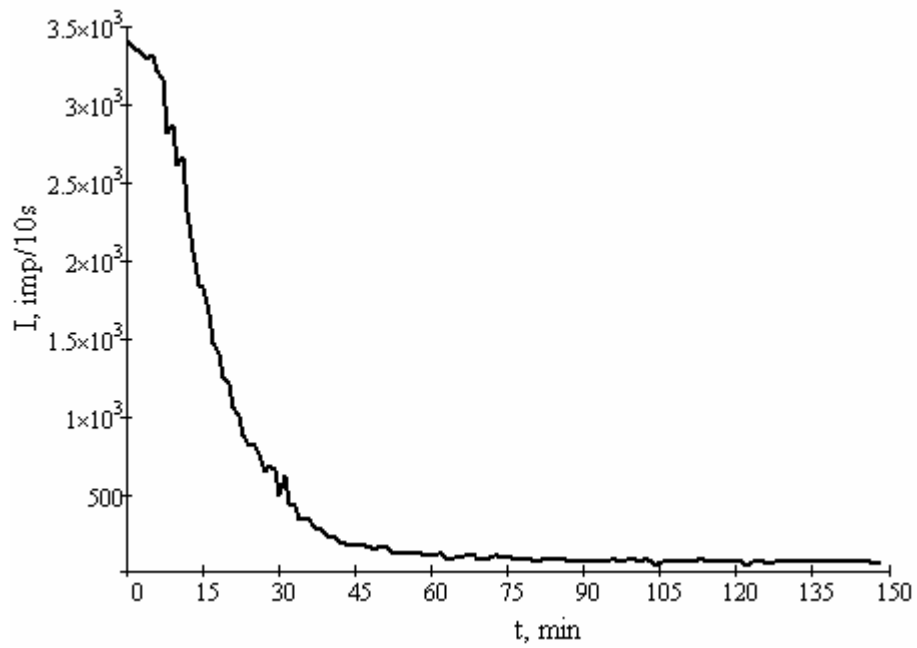
Pasinaudojus matavimais ir (34), (35) formulėmis, kai  $\lambda = 1.5405$ ,  $\vartheta = 47.49^\circ$ , 2.4 pav. pateikta generuotų vakansijų tankio priklausomybė nuo šaknies iš laiko.



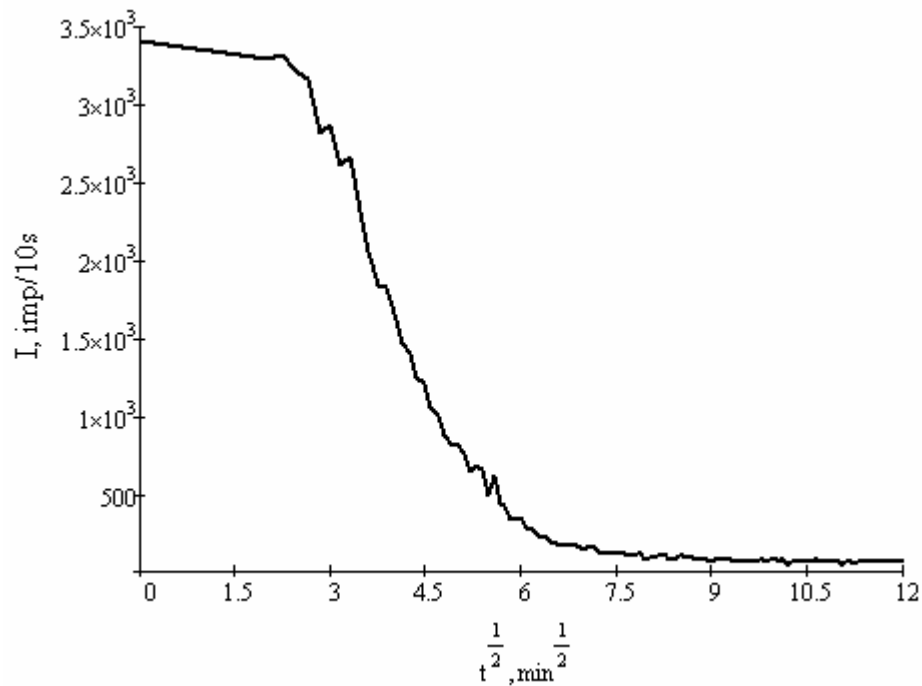
2.4 pav. Generuotų vakansijų tankio priklausomybė nuo šaknies iš laiko Rentgeno spindulių atspindžio zonoje, kai  $U_a=10$  kV ir  $I_a=23$  mA

Kitame atliktame eksperimente, silicio pavyzdėlis buvo švitinamas Rentgeno spinduliuote, esant 10 kV anodinei įtampai ir 6 mA anodinei srovei. Tuo pat metu buvo matuojama ir silicio difrakcinio spektro smailės intensyvumo priklausomybė nuo švitinimo laiko. Remiantis šiais matavimais, nubrėžti silicio difrakcinio spektro smailės intensyvumo priklausomybės nuo švitinimo laiko (2.5 pav.) ir nuo šaknies iš švitinimo laiko (2.6 pav.) grafikai.

Naudojant formulę (26), galima apskaičiuoti vidutines kvadratinės nuokrypas  $\overline{\Delta u_{sIX}^2}$ , sąlygotas dėl Rentgeno spinduliuotės poveikio susidariusių papildomo skaičiaus defektų (vakansijų). 2.7 pav. pateiktas vidutinių kvadratinių nuokrypų silicio gardelėje priklausomybės nuo šaknies iš švitinimo laiko grafikas.

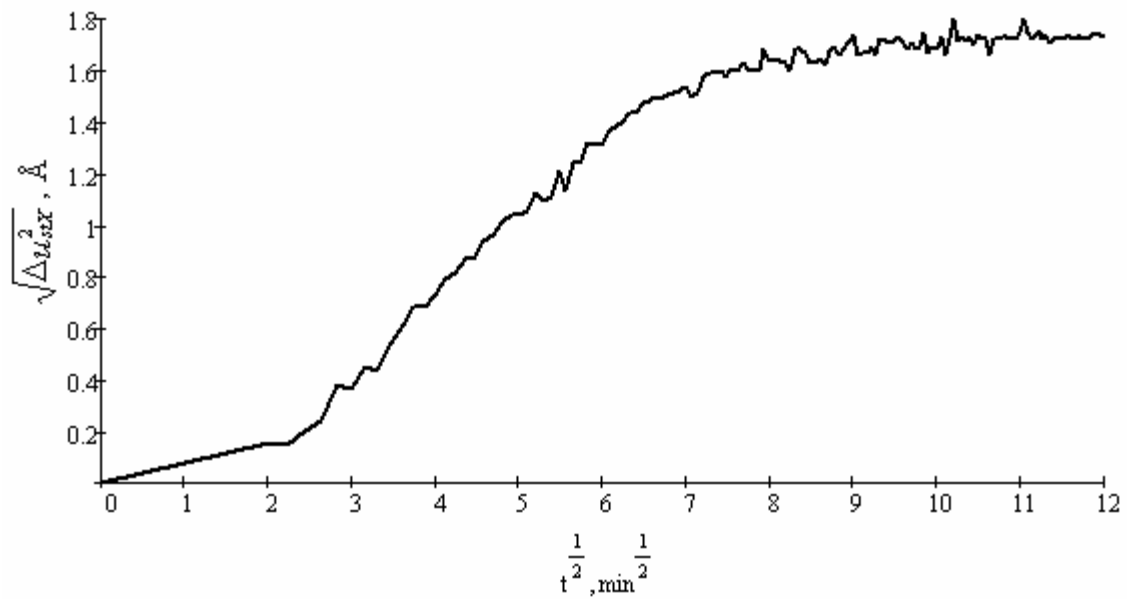


2.5 pav. Silicio difrakcinio spektro smailės intensyvumo priklausomybė nuo švitinimo laiko, kai  $U_a=10$  kV ir  $I_a=6$  mA

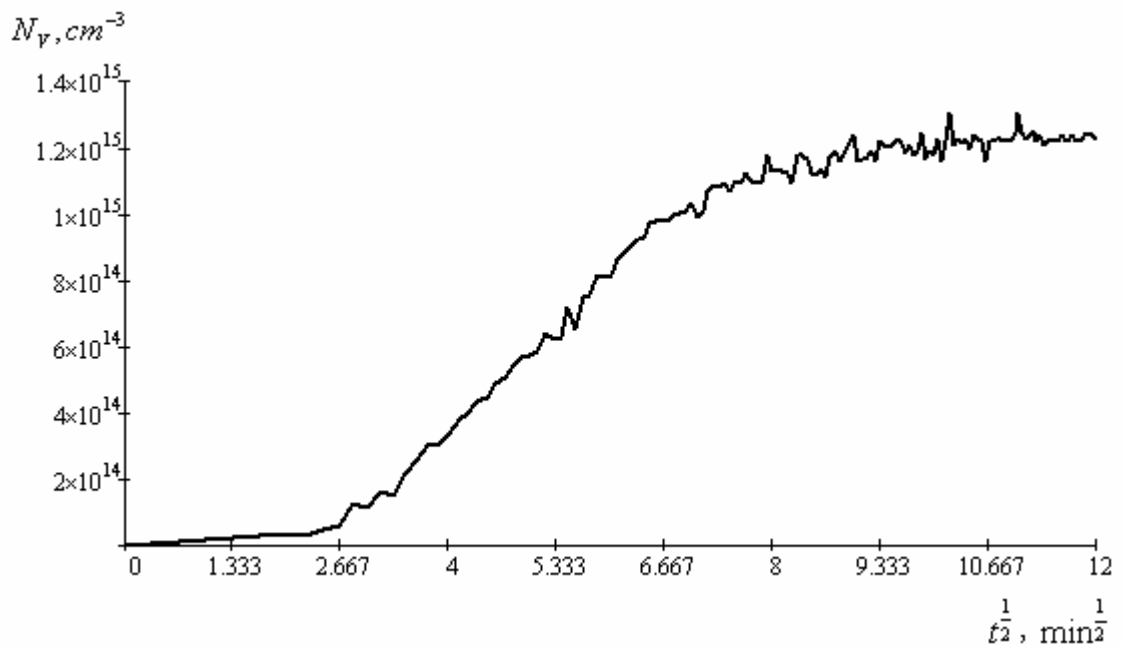


2.6 pav. Silicio difrakcinio spektro smailės intensyvumo priklausomybė nuo šaknies iš švitinimo laiko, kai  $U_a=10$  kV ir  $I_a=6$  mA

Pasinaudojus matavimais ir (34), (35) formulėmis, kai  $\lambda = 1.5405$ ,  $\vartheta = 14.21^\circ$ , 2.8 pav. pateikta generuotų vakansijų tankio priklausomybė nuo šaknies iš laiko.



2.7 pav. Vidutinių kvadratinių nuokrypų silicio gardelėje priklausomybė nuo šaknies iš švitinimo laiko, kai  $U_a=10$  kV ir  $I_a=6$  mA



2.8 pav. Generuotų vakansijų tankio priklausomybė nuo šaknies iš laiko Rentgeno spindulių atspindžio zonoje, kai  $U_a=10$  kV ir  $I_a=6$  mA

## IŠVADOS

1. Rastas matematinis Rentgeno spindulių Brego atspindžio santykinis intensyvumo pasikeitimas yra susijęs su difuzine sklaida.
2. Vietoj paprastai naudojamos difuzinės sklaidos, panaudojus santykinį Brego atspindžio intensyvumo pokytį, buvo nustatyta taškinių defektų koncentracija.
3. Naudojant minėtą metodą, buvo išmatuoti taškinių defektų profiliai (pasiskirstymas) kristale.
4. Gautos vakansijų koncentracijos, naudojant Brego atspindžius, sutampa su elektrinių matavimų rezultatais, kas rodo teorijos teisingumą.
5. Pasiūlytas Brego atspindžio metodas vakansijų koncentracijai matuoti yra tikslesnis už rezultatus gautus elektrinių matavimų būdu, nes įskaito ir neutralias vakansijas.
6. Darbe gauti rezultatai turi neabejotiną mokslinę ir praktinę vertę.



## LITERATŪROS SĄRAŠAS

1. Ahrens T. J. Mineral physics and crystallography: a handbook of physical constants. Washington, 1995.
2. Ashcroft N. W. Mermin N. D. Solid state physics. Orlando, 1976.
3. Bubenikov A. N. Modeling Integral Microtechnologies, Devices and schemes. Moscow, 1989.
4. Dargys A., Kundrotas J. Handbook on physical properties of Ge, Si, GaAs and InP. Vilnius, 1994.
5. Entin I.R., Khrupa V.I. Spatial intensity profile of X-ray beam reflected from nearly perfect silicon and diffuse scattering measurement // J. Appl. Cryst., 24(4), pp.403-404 (1991).
6. Gauglitz G., Vo-Dinh T. Handbook of spectroscopy. Weinheim, 2003.
7. Janavičius A.J. // Phys. Lett. A, V. 224, p. 159 (1997).
8. Janavičius A.J., Norgėla Ž., and Purlys R. Nonlinear diffusion in excited Si crystals // The European physical journal, Appl. Phys. 29, 127-131 (2005).
9. Janavičius A.J., Storasta J., Purlys R., Mekys A., Balakauskas S. and Norgėla Ž. Crystal lattice and carriers Hall mobility relaxation processes in Si crystal irradiated by soft X-rays // Acta Phys. Pol. A, Vol. 112 (2007).
10. Kittel C. Introduction to solid state physics. New York, 1996.
11. Lang A. R., Zheng-Hong M. Pendellosung fringes in the Bragg reflection of X-ray from a crystal surface // Proc. R. Soc. Lond. A368, pp.313-320 (1979).
12. Matare H. F. Defect Electronics in Semiconductors. New York, 1971.
13. Nordlund K., Partyka P. and Averback R.S. Fully atomistic analysis of diffuse X-ray scattering spectra of silicon defects // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 469 (1997).
14. Purlys R., Janavičius A.J., Mekys A., Balakauskas S., and Storasta J. Electrical conductivity of Si and GaAs monocrystals excited by soft X-rays // Lithuanian Journal of Physics, 41, No. 4-6, 376-380 (2001).
15. Singh J. Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures. Cambridge, 2003.
16. Strzalkowski A. Introduction to nuclear physics. Warsaw, 1978.
17. Takagi S. A dynamical theory of diffraction for a distorted crystal // J.Phys. Soc. Jap. 26(5), pp.1239-1253 (1969).

18. Van Vechten J. A. // Phys. Rev. B 10, 1482 (1974).
19. Афанасьев А. М., Александров П. А., Имамов Р. М. Рентгеновская структурная диагностика в исследовании приповерхностных слоев монокристаллов. Москва, 1986.
20. Барьяхтар В. Г., Гуреев А. Н., Кочелаб В. В., Молодкин В. Б., Олиховский С. И. Полное интегральное Брэгг-отражение Рентгеновских лучей и определение структурного совершенства реальных кристаллов // Металлофизика, 11(3), pp.73-78 (1989).
21. Бокштейн Б. С. Атомы блуждают по кристаллу. Москва, 1984.
22. Гаврилов Е. Н., Кисловский Е. Н., Молодкин В. Б., Олиховский С. И. Брэгг-дифракция Рентгеновских лучей в реальных поглощающих монокристаллах конечной толщины // Металлофизика, 14(3), pp.70-78 (1992).
23. Кашкаров П. К. Образование точечных дефектов в полупроводниковых кристаллах. Москва, 1999.
24. Мачулин В. Ф., Хрупа В. И. Рентгеновская диагностика структурного совершенства слабо искаженных кристаллов. Киев, 1995.
25. Молодкин В. Б., Олиховский С. И., Кисловский Е. Н., Кривицкий В. П. // Металлофизика и новейшие технологии, 19(12), pp. 25-34 (1997).
26. Пинскер З. Г. Рентгеновская кристаллооптика. Москва, 1982.
27. Финкель В. А. Низкотемпературная рентгенография металлов Металлургия. Москва, 1971.