

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

**VAIDAS STUKNYS**

**RADIACIJOS GENERUOTI TAŠKINIAI DEFEKTAI IR  
JŲ REAKCIJOS**

Magistrantūros studijų programos “Fizika”

**MAGISTRO DARBAS**

Mokslinis vadovas  
dr. Žilvinas Norgėla

**Šiauliai, 2009**

**Turinys**

Įvadas_____	3 psl.
1. Rentgeno spinduliuotės šaltiniai ir spinduliuotės savybės_____	6 psl.
2. Radiaciniai defektai_____	11 psl.
2.1. Kristalų defektai_____	11 psl.
2.2. Defektų kūrimasis švitinant Rentgeno spinduliuote ar didelės energijos dalelėmis silicio monokristaluose_____	13 psl.
3. Defektų identifikavimo metodai_____	19 psl.
3.1. Giliųjų lygmenų trumpalaikė spektroskopija (DLTS)_____	19 psl.
3.2. Antrinė jonų masės spektroskopija (SIMS)_____	21 psl.
3.3. Furje transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopija (FT-IR)_____	22 psl.
3.3.1 IR dažnių diapazono ir spektro aprašymas_____	22 psl.
3.3.2 FT-IR spektroskopijos taikymas silicyje esančių O <sub>i</sub> ir C <sub>s</sub> analizei_____	26 psl.
4. Defektų reakcijos ir defektų identifikavimas_____	30 psl.
5. Eksperimento rezultatai_____	37 psl.
Išvados_____	49 psl.
Literatūros sąrašas_____	50 psl.

## **Anotacija**

Šiame darbe nagrinėjami radiaciniai defektai bei jų tarpusavio reakcijos silicyje. Atlikti eksperimentai, kurių metu pasitelkus minkštąją Rentgeno spinduliuotę buvo generuojami defektai. Vėliau bandiniai buvo tiriami FT-IR spektroskopijos metodais. Darbo apimtis 52 puslapiai. Darbas susideda iš 5 dalių.

Pirmoje dalyje apžvelgiami Rentgeno spinduliuotės šaltiniai ir spinduliuotės savybės.

Antroje - dalyje radiaciniai defektai silicyje.

Trečioje - defektų tyrimo metodai.

Ketvirtoje - dalyje defektų reakcijos.

Penktoje - eksperimento metodika ir eksperimento rezultatai.

## **Annotation**

In this work, we are researching radiation defects and their reactions in silicon. During experiments defects were generated using soft Rentgen radiance. Later samples were researched using FT-IR methods of spectroscopy. Work amount is 52 pages. Work consists from 5 parts.

First part - overview of sources and features of Rentgen radiance.

Second part – radiation defects in silicon.

Third part – methods of defect researching.

Fourth part – reactions of defects.

Fifth part – Methods and results of experiment.

## Ivadas

Radiaciniams defektams kurti populiariausi yra švitinimai elektronais, neutronais ir gama spinduliuote, nes pastarieji, lyginant su protoniniu, turėtų sukelti mažesnę priemaišinių legiravimą. Toks legiravimas gali atsirasti sužadinus iki tol neaktyvias priemaišines būsenas, realiuose kristaluose priverčiant skverbtis deguoniui iš savojo oksido sluoksnio, ar, naudojant neutronus, vykstant branduolinėms reakcijoms. Kadangi švitinant kartu vyksta kristalinės gardelės pažeidimai, atsiranda ir nauji legiruojantys (ar kompensuojantys) centrai. Pastarieji susiformuoja kaip taškiniai veikiant elektronais ar gama fotonais arba kaip sankaupos iš kelių taškinių (vadinamos klasteriais), kai spinduliuojama greitaisiais neutronais. Klasteriai atsiranda pirminiams defektams (vakansija ir tarpmazgis) jungiantis tarpusavyje ar su liekamosiomis priemaišomis. Kiekviena nauja tokių junginių konfigūracija yra savaip įdomi, todėl yra tiriama šių junginių temperatūriniai stabilumai bei jų kuriami elektriniai reiškiniai. Taip pat svarbu žinoti, kaip elgiasi atkaitinami defektai, kokių naujų junginių galima tikėtis, koks tuomet susidaro efektyvusis legiravimas, kokie pasireiškia krūvininkų pernašos mechanizmai ir t.t.

Kristalai tyrimo metu veikiami paprastai vienos, iš anksčiau paminėtų, rūšies spinduliuote stengiantis identifikuoti kuo smulkmeniškiau pirminių defektų reakcijų mechanizmus.

Kaip alternatyvą gama fotonams, patogiu yra naudoti Rentgeno spinduliuotę, nes pirminiams defektams jos pakanka bei patogus yra šios spinduliuotės gavimo būdas.

Rentgeniniu švitinimu kuriami tik tai taškiniai defektai. Jų susijungimas į stambesnius klasterius galimas tik esant pakankamai didelėms koncentracijoms.

Labiau tikėtina, kad vakansijos ir tarpmazgiai jungsis ne tarpusavyje, formuodami di-, tri- ar stambesnius junginius, o daugiausiai jungsis su priemaišomis C ar O, kurių visada gausu Si, arba su B, P, Al ar kitomis, kurios atsiranda auginimo metu (pvz., iš boro-silikatinių tiglių), užima elektriškai neaktyvias padėtis iki nesusijungia su kitais defektais. Stambesni junginiai - klasteriai, burbulai, taip pat yra tikėtini.

Kadangi anglis ir deguonis - pagrindiniai centrai, sąveikaujantys su Frenkelio defektais, jų indėlis aktyviausiai tyrinėtas. Nustatyta, kad deguonis, priešingai nei anglis pagerina atsparumą radiacijai. Deguonis sugaudo švitinimo metu kuriamas vakansijas į  $VO_i$  centrus. Kartu besikuriančius tarpmazgius sugaudo mazginė anglis, formuojantis  $C_i$ , kuri yra labai judri,

reaguoja į stabilius junginius su Cs ar Oi. Dar vienas svarbus defektas - užkrauta divakansija. V<sub>2</sub> tiesioginis spartus formavimasis vyksta švitinant hadronais, tuomet kuriasi daugybė defektų greta, tarp kurių vyksta ir krūvio mainai.

**Problema:**

Radiacinių defektų atsiradimas, identifikavimas bei kontroliavimas yra svarbūs aspektai tiriant silicį, bei jį naudojant naujosioms technologijoms.

**Tyrimo objektas:**

- Radiaciniai defektai bei jų identifikavimas.

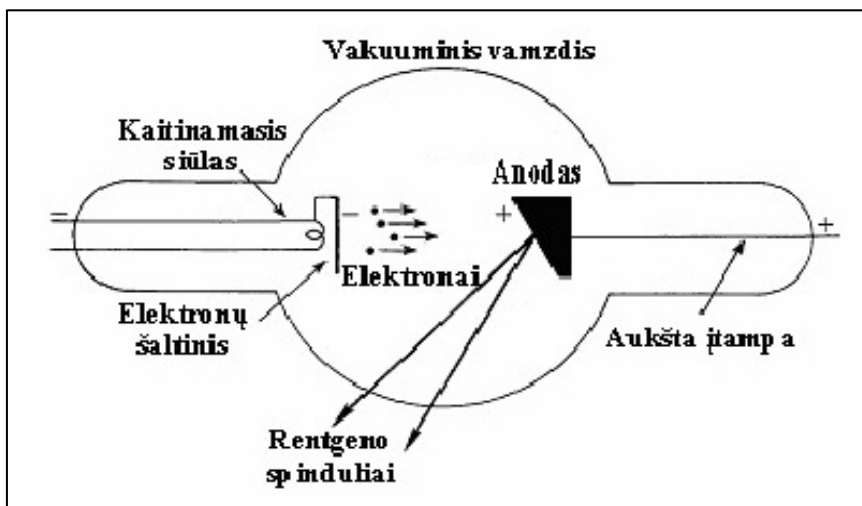
**Tikslas:**

- Susipažinimas su literatūra apie rentgeno spinduliuotę, radiacinius defektus, jų kūrimo bei identifikavimo būdus;
- Rentgeno aparato veikimo principo nagrinėjimas;
- Silicio radiacinių defektų tyrimas veikiant Rentgeno spinduliais.

## 1. Rentgeno spindulių šaltiniai ir spindulių savybės

Rentgeno spinduliai tai yra elektromagnetinės bangos, kurių bangos ilgis yra 10 - 0,01 nm, dažnis nuo 30 iki 30 000 PHz. Fotonų energija – 0,1 - 100 keV. (Šie skaičiai įvairiuose literatūros šaltiniuose gali šiek tiek skirtis, nes ribos nėra griežtai apibrėžtos). Rentgeno diapazonas dar skirstomas į minkštą (mažiausios energijos) ir kietą (didžiausios energijos) rentgeno spinduliavimą.

Rentgeno spinduliavimą gaunama taip vadinamame Rentgeno vamzdyje (1.1. pav.), anodo medžiagos atomų branduolių ir elektronų elektrostatiniu lauku stabdant elektringąsias daleles (elektronus). Kaitinamuoju siūlu įkaitinus katodą, iš jo spinduliuojamas elektronų srautas. Anodas turi pasvirusį paviršių tam, kad nukreiptų susidariusią rentgeno spinduliavimą tam tikru kampu. Anodas gaminamas iš šilumai laidžios medžiagos, o jo paviršius padengiamas sunkiai besilydančiomis medžiagomis (paprastai didelio eilės numerio elementais, pavyzdžiui, volframu). Tarp katodo ir anodo prijungama keliasdešimties tūkstančių voltų įtampa; susidaręs elektrinis laukas labai įgreitina elektronus, suteikia jiems didelę kinetinę energiją. Pasiėkusių anodą elektronus jo medžiaga smarkiai stabdo, tokiu būdu atsiranda elektromagnetinis Rentgeno spinduliavimas.

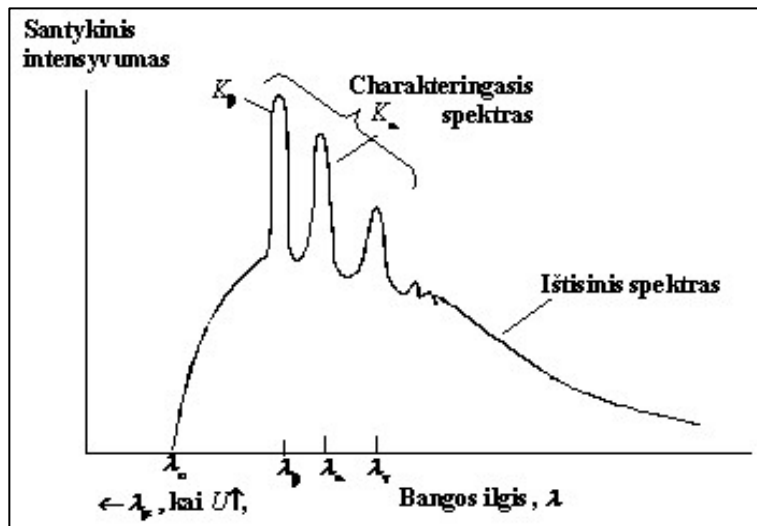


1.1. Pav. Rentgeno vamzdis

Stabdant elektronus, dalis energijos sunaudojama Rentgeno spinduliuotei gauti, o kita dalis virsta anodo šilumine energija, todėl dažnai naudojamas besisukantis anodas, kad jis neperkaistų.

Kol įtampa vamzdyje, o tuo pačiu ir elektronų energija nepasiekia tam tikros vertės, Rentgeno spinduliuotė sklaidžia patys stabdomi elektronai. Kadangi nevienoda jų energijos dalis virsta šiluma, šių spindulių bangos ilgai taip pat būna skirtingi. Vadinasi, stabdant elektronų srautą, spinduliuojamas ištisinis Rentgeno spindulių spektras ("baltasis" spektras; (1.2. pav.)). Elektronai, atsimušdami į anodą, gali padidinti jo atomų energiją. Kai elektrono energijos užtenka išplėsti atomo elektroną iš kurio nors vidinio sluoksnio, atsiranda vadinamieji charakteringieji Rentgeno spinduliai: atsiradusią laisvą vietą tame sluoksnyje užima vienas iš elektronų, esančių aukštesniuose energijos lygmenyse ir t.t. Taigi Rentgeno spindulių spektre yra atskiros intensyvios charakteringųjų spindulių linijos (1.2. pav.). Rentgeno linijinių spektrų serijos susideda iš nedaug linijų. Skirtingų elementų spektruose randamos to paties tipo linijų serijos besiskiriančios tik tuo, kad sunkesniųjų elementų atitinkamos serijos yra pasislinkusios į trumpesniųjų bangų sritį. Vadinasi, Rentgeno spindulių linijinis spektras yra būdingas anodo medžiagai, todėl šie ir vadinami charakteringaisiais. Būdinga tai, kad kiekvieno elemento Rentgeno spindulių charakteringasis spektras nepriklauso nuo to, ar šis elementas yra chemiškai susijungęs su kitais elementais, ar ne. Kitaip yra su optiniais spektrais: junginių ir grynų elementų optiniai linijiniai spektrai skiriasi. Charakteringasis Rentgeno spinduliavimas yra susijęs su procesais, vykstančiais gilesniuose atomo elektronų sluoksniuose, ir todėl Rentgeno spindulių linijinis spektras yra individuali elemento charakteristika. [1]





1.2. pav. Rentgeno spinduliuotės spektrai

Stabdant elektronus gaunamas baltasis spektras su nenutrūkstamu energijų pasiskirstymu nuo bangos ilgio. Maksimali elektronų pluoštelio energija nusako minimalų bangos ilgį (Å):

$$\lambda_{\min} = ch/ev = 12,39/v, \quad (1.1)$$

čia  $v$  – potencialų skirtumas Rentgeno vamzdyje, greitinantis elektronus (kV).

Pasiskirstymo maksimumas yra ties:

$$\lambda_{\max} = (3/2) \cdot \lambda_{\min}. \quad (1.2)$$

Ilgabangę sritį riboja Rentgeno vamzdžio medžiagos skaidrumas (Be folija, kurios storis 0,2mm) ir sugertis ore. Baltojo spektro intensyvumas:

$$I_S = k_l \cdot i \cdot v^2 \cdot Z, \quad (1.3)$$

čia  $k_l$  - proporcingumo koeficientas,  $i$  - srovės stipris,  $v$  - potencialų skirtumas,  $Z$  - atominis skaičius.

Stabdomi elektroni, kurių energija didesnė už  $v_B$  (K, L ir t.t. vidinių atomo sluoksnių sužadavimo energija) gali atomus sužadinti. Grįžtant atomui iš sužadintos būsenos, jis spinduliuoja fotoną  $h/\lambda$ , čia  $\lambda$  - apibrėžtas charakteringojo spinduliavimo bangos ilgis, priklausantis tik nuo anodo sudėtinio elemento numerio.

Charakteringojo spektro intensyvumas yra:

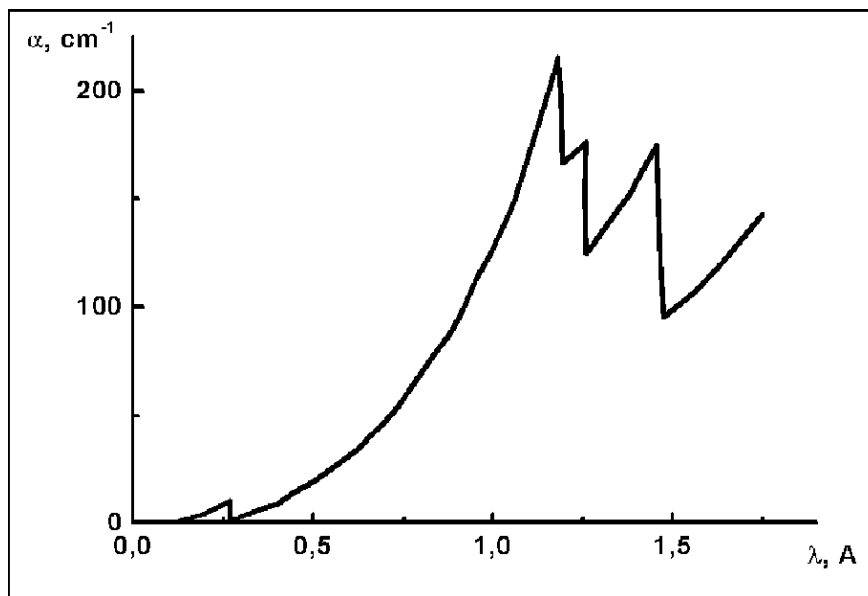
$$I_{char} = k_2 \cdot i \cdot (v - v_B)^n, \quad (1.4)$$

čia  $k_2$  - proporcingumo koeficientas,  $n$  - iš eksperimento randamas koeficientas, kurio vertė 1,7.

Elektros energijos pavertimas Rentgeno spinduliuote neviršija 0,5-1%. Maksimalius elektrinius režimus riboja terminis anodo stabilumas (lydymosi temperatūra, šilumos nuvedimas, garavimas vakuume) ir maksimali galima srovė per elektroninę patranką (katodą).

Krintantys į medžiagą Rentgeno spinduliai sąveikauja su jos atomais. Stebimi procesai: sklaida be energijos pasikeitimo (koherentinė), nedideli energijos praradimai dėl netamprios sklaidos (Komptono sklaida), fotonų sugertis, dėl kurios atomas jonizuojamas (ar sužadinamas), tuomet energija gali būti išspinduliuojama fotoelektronu arba nauju fotonu (fluorescencija), kurio energija atitinka sužadinto atomo charakteringąjį spektrą.

Lengviems elementams (pvz., anglis) Komptono sklaidos intensyvumas 5-6 kartus stipresnis nei koherentinis, sunkiems - silpnesnis.



1.3. pav. Rentgeno spinduliuotės sugerties koeficiento priklausomybė nuo bangos ilgio. [2]

Dėl minėtų procesų, sklindančio medžiaga Rentgeno spindulių pluoštelio intensyvumas silpsta pagal dėsnį  $I_P = I_0 e^{-\alpha x}$ , čia  $\alpha$  – sugertiems koeficientas,  $x$  – sklidimo nuotolis. Naudojami ir masiniai sugerties koeficientai:  $\alpha/\rho$ . Čia  $\rho$  - sugeriamos medžiagos masės tankis. Jei sugėriklyje yra keli elementai su savais  $\alpha$  bei koncentracijomis  $c_i$  (%), tai efektyvusis koeficientas:

$$\alpha_{ef} / \rho = \sum_i (\alpha / \rho) \cdot c_i. \quad (1.5)$$

Sugerties koeficiento tipinė priklausomybė nuo bangos ilgio parodyta 1.3 pav.: kai energija atitinka kokio nors atominio apvalkalo jonizacijos energiją, stebimas šuoliukas, o tarp šuolių sugerties koeficientas proporcingas  $\lambda^3$  [2].

Esant mažos energijos spinduliutei, pirminė sąveika su medžiaga vyksta fotoabsorbciniu ir koherentinės sklaidos mechanizmais. Kuomet medžiaga sugeria Rentgeno spinduliute, fotono pagavimo (fotoabsorbcijos) skerspjūvis yra:

$$\sigma = 2\lambda r_0 f, \quad (1.6.)$$

čia  $\lambda$  - fotono bangos ilgis,  $r_0$  - klasikinis elektrono spindulys,  $f$  - sklaidos faktorius. Komptono sklaidos pagavimo skerspjūvis čia neįskaičiuotas, nes jis pasireiškia labiau lengvesniems elementams ( $Z < 10$ ) bei esant didesnėms energijoms [3].

## 2. Radiaciniai defektai

### 2.1. Kristalų defektai

Bet kokie nukrypimai nuo idealaus kristalo vadinami **gardelės defektais**. Visi gardelės defektai gali būti suskirstyti į 3 grupes: tai **taškiniai**, **vienmačiai** ir **dvimačiai** defektai. Taškiniai defektai savo ruožtu, gali būti **energetiniai**, **elektroniniai** ir **atominiai**.

**Taškiniai energetiniai defektai** dažniausiai susidaro aukštesnėse temperatūrose. Gardelės atomams svyruojant apie pusiausvyros padėtį, jie nukrypsta nuo pusiausvyros padėties tai į vieną, tai į kitą pusę ir translacinė simetrija pažeidžiama. Kitą taškinių defektų rūšis stebima tuomet, jei Rentgeno,  $\gamma$  spindulių,  $\alpha$  dalelių srautu kai kurie gardelės atomai sužadunami.

**Taškiniai elektroniniai defektai** susidaro atskirus gardelės atomus pakeistus kitokio valentingumo atomais. Šie defektai vadinami donorinėmis arba akceptorinėmis priemaišomis. Šios priemaišos keičia laisvųjų krūvininkų koncentraciją.

**Taškiniai atominiai defektai** susidaro tuomet, kai atskiruose taškuose pažeidžiama erdvinės gardelės struktūra, nekeičiant elektronų koncentracijos. Jie gali būti įvairių rūšių - pakeitimo, įterpimo defektai ir vakansijos. Pakeitimo defekto atveju, mazge esantis atomas pakeičiamas kitu, nors ir to paties valentingumo atomu. Šis defektas ypač ryškiai pasireiškia, jei naujas atomas yra žymiai didesnis (arba mažesnis) už gardelės atomus - toks defektas deformuoja pačią gardelę ir atominės plokštumos arti defekto pasidaro ne plokščios (išgaubtos arba įgaubtos). Įterpimo defektas gaunamas tuomet, jei tarpmazgyje atsiranda atomas (iš to paties kristalo, arba svetimas). **Vakansijos** - tai neužimti mazgai gardelėje. Jos žymimos simboliu  $V$ . Joniniuose kristaluose mazge gali trūkti teigiamo arba neigiamo jono, todėl vakansijos joniniuose kristaluose gali būti katijoninės  $V^+$  ir anijoninės  $V^-$ . Vakansijų atsiradimo priežastis yra paprasta: atomų šiluminės energijos yra nevienodos, todėl kai kurie atomai gali įgyti pakankamai energijos ir iš mazgo pereiti į tarpmazgį. Toliau difuzijos dėka susidariusieji vakansijos ir įterpimo defektai gali nutolti vienas nuo kito. Tokie defektai, kai susidaro vakansijos ir įterpimo defekto pora vadinami **Frenkelio pora**. Susidaręs įterpimo defektas gali pasiekti kristalo ribą ir ten pasilikti, (lyg ir pratęsdamas gardelę) arba išgaruoti iš kristalo. Defektai, kai kristale lieka vienos vakansijos (be įterptų atomų) vadinami **Šotki** (W. Schottky) defektais. Ypač greitai defektai susidaro

junginiuose, jei viena iš junginio komponentų gali turėti įvairius valentingumus - šiuo atveju susidarant vakansijoms gali kisti kristalo stechiometrija. Kristalas vadinamas stechiometrišku, jei jo sudėtis tiksliai atitinka jo cheminę sudėtį. Dažnai pakitusi stechiometrija stebima tik prie kristalo paviršiaus.[3]

## 2.2. Defektų kūrimasis švitinant Rentgeno spinduliuote ar didelės energijos dalelėmis silicio monokristaluose.

Defektus kristale galime sukurti įvairiais būdais: Šildydami-šaldydami, deformuodami ar apspinduliuodami didelės energijos dalelėmis. Radiaciniam defektams (Si) kristaluose tirti naudojama įvairių rūšių spinduliuotė: 10 keV – 2 MeV energijos elektronai, jonai, neutronai, protonai,  $\gamma$  spinduliai. Šiame darbe pasitelkti minkštieji Rentgeno. Radiaciniais defektais vadinami kietųjų kūnų struktūros pažeidimai atsirandantys dėl didelės energijos radiacijos poveikio [18]. Paprasčiausi defektai - vakansija ir tarpmazgis (Frenkelio poros).

Susidarant Frenkelio poroms vyksta reakcijos:



čia  $C_S$ ,  $C_I$  – priemaišų tankiai mazguose ir tarpmazgiuose,  $V$  – vakansijų tankis,  $I$  – tarpmazginių atomų tankis.

Atliekant sublimacijos eksperimentus nustatyta, kad kietųjų kūnų sublimacijos energija yra apie 5eV, todėl daroma prielaida, kad tūryje esančių atomų ryšio energija gali būti apie 10-100 eV. Fononų energija gerokai mažesnė. Didelių energijų dalelės tamptariai sąveikauja su kristalo atomais gerokai trumpesnį laiką nei kristalo virpesiai, t.y kristalas nespėja relaksuoti. Taip pat energiją galima perduoti gardelei nesmūginiais procesais, kuomet galima tikėtis sukurti defektą su energija, mažesne, nei reiktų smūginio proceso metu. Nustatyta, kad minkštieji Rentgeno spinduliai ir mažų energijų elektronai (10-100 keV) tam visai tinka.

Anksčiau manyta, kad rentgeno kvantai sukuria laisvus elektronus, kurie sugaudomi jau kitais procesais sukurtuose defektuose, tačiau netrukus po to nustatyta, kad kambario temperatūroje minėtuose kristaluose beveik nėra laisvų anijoninių vakansijų, o tik kompleksai iš katijoninių ir anijoninių vakansijų. Vieną kartą jonizuotų atomų ryšiai gali būti dar pakankamai stiprūs, ir nors rentgenas gali jonizuoti atomą dar kartą, tokia tikimybė yra maža. Žymiai efektyviau daugkartinė jonizacija vyksta dėl Ože (Auger) proceso, prieš tai atomą jonizuojant Rentgeno spinduliuote iš gilių sluoksnių (K, L, M...). Esant stipriai krūvio lokalizacijai joniniuose kristaluose daugkartinės jonizacijos sukurtos elektrostatinės jėgos pakanka išstumti perteklinį krūvį turintį atomą į tarpmazgį (M. I. Klingerio modelis) arba dalyvaujant fononams (Varli modelis). Analogiškai silicyje toks procesas galimas laikant Si atomą anijonu ( $Si^-$ ), o katijonų

vaidmuo tektų ant gretimų atomų lokalizuotos skylutės ( $\text{Si}^+$ ). Efektyviausias defektų kūrimosi greitis silicyje jonizuojant K sluoksnį pasiekiamas švitinant 8-10 keV energija, o slenkstinė energija yra 6 keV, procesas  $p$  tipo Si vyksta gerokai intensyviau nei  $n$  tipo ( $p$  tipas kuriamas vieną ryšį nutraukiant, likusiems nutraukti pakanka mažiau energijos).  $n$  tipo Si gausu laisvųjų krūvininkų, kurie paspartina rekombinacijos su skylėmis (giliuose sluoksniuose) procesus, keliant temperatūrą stebimas tas pat dėsningumas susijęs su laisvųjų krūvininkų gausėjimu - defektų generacija silpsta [4], o didelių energijų smūginiai procesai  $n$  tipo Si kuria defektus efektyviau nei  $p$  tipo. Kuomet kristale gausu legiruojančių priemaišų, jų dėka dėl elektrostatinės sąveikos taip pat skatinamas defektų kūrimasis. Šiuo atveju donorinės priemaišos yra efektyvesnės, nes turi teigiamą krūvį ir daugkartinį jonizuotą kaimyną stumia nuo savęs. Tokie defektų kūrimosi procesai yra lėti ( $\tau_1 \geq \tau_D \approx 10^{-14}$  s, čia  $\tau_D$  - Debajaus virpesių periodas), smūginės jonizacijos - daug greitesni ( $\tau_2 \ll \tau_D$ ). Defektų kūrimosi dėl priemaišinio - jonizacinio mechanizmo skerspjūvis gali būti užrašytas taip:  $\sigma_I = c \sum_i \sigma_i Z_i$ , čia  $c = N_{\text{priem}} / N_{\text{krist}}$  - santykinė priemaišų koncentracija,  $\sigma_i$  -  $i$ -tojo lygmens jonizacijos skerspjūvis,  $1 \leq Z_i \leq 100$  - laisvas teorijos parametras, proporcingas atomų, galinčių dalyvauti kuriantis defektams, skaičiui. Eksperimentiškai jis apibrėžiamas kaip:  $Z_{\text{Eksp}} = \sigma_{\text{Eksp}} / \left( c \sum_i \sigma_i \right)$ . Jei jo vertė yra tame intervale (1-100), laikoma, kad defektų kūrimosi mechanizmas yra efektyvus. Germanyje  $Z_{\text{Eksp}} \approx 4$ , o silicyje  $Z_{\text{Eksp}} \leq 0,002$ .

Si kristaluose su dideliu deguonies tankiu ( $10^{18}/\text{cm}^3$ ) žematemperatūrinio atkaitinimo metu izoliuotų vakansijų nykimo greitis gerokai didesnis nei Si, kuriame deguonies mažai ( $10^{16}/\text{cm}^3$ ). Atkaitinant bedeguonį Si, atsiranda divakansijos jungiantis monovakansijoms atsiradusioms švitinant [4].

Anksčiau manyta, kad taškinių defektų kūrimasis tūryje dėl apspinduliavimo daugiausiai susijęs su smūginiu atomų išmušimu iš gardelės mazgų. Tačiau jau aišku, kad galimas ir kitoks mechanizmas, kai spinduliuotės energija per maža tiesiogiai tai padaryti [5]. Kuriami paviršiniai defektai spinduliavimo skatinami gali migruoti į tūrį, arba giliau esantiems atomams jonizuojami (sužadunami) gilesnių sluoksnių elektronai, o tai leidžia pastariesiems lengviau palikti gardelės mazgą. Tokiu būdu vykdoma netermiškai stimuliuojama difuzija. Sužadintam atomui barjeras peršokti į tarpmazgį sumažėja. Tam, kad atomas peršoktų į tarpmazgį, jam turi būti suteikta papildoma energija greičiau, nei jis egzistuoja sužadintoje būsenoje. Barjero aukštis mažėja sulig jonizacijos laipsniu, tačiau labiau jonizuotam atomui

kristale gyvavimo trukmė taip pat mažėja. Defektui sukurti reikalinga keletu elektronvoltų energija. Jėgos tokiam defektui kurti reikalingos apie  $1\text{eV}/\text{\AA}$  per laiką, atitinkantį gardelės svyravimo dažnį  $\sim 10^{-13}$  s. Smūginiam atomo išmušimui reikalingos daug didesnės jėgos dėl daug trumpesnio sąveikos laiko. Taigi, nesmūginiam atomo išmušimui reikia, kad jono gyvavimo trukmė viršytų  $10^{-13}$  -  $10^{-12}$  s. Atlikti tyrimai parodė, kad dukart jonizuoti anijonai šarminių metalų - halogenidų kristaluose nespėja įgyti pakankamai energijos peršokti į tarpmazgį, tačiau tai pakankamai efektyvu kai kuriuose puslaidininkiuose, mat ten kuloninė stūma tarp gretimų atomų gali trukti ilgesnį laiką, sąlygotą Ože proceso giliuose lygmenyse. Ši tokiu būdu gali atsirasti  $V_2$ .

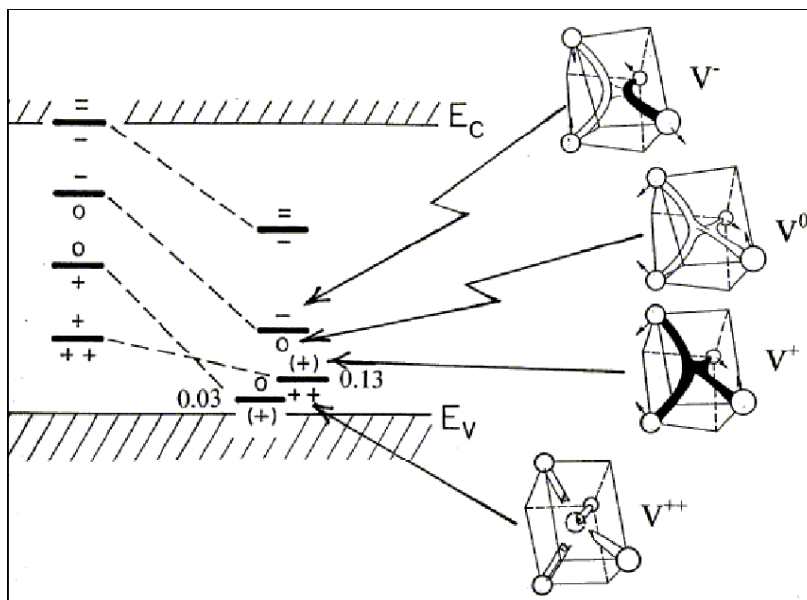
Karpovas ir Klingeris analizavo taškinių defektų atsiradimą dėl jonizuoto mazginio ir greta esančio sužadinto priemaišinio atomų kuloninės sąveikos. Autoriai parodė, kad Ože proceso metu, neterminė jonizuoto atomo išmušimo tikimybė didesnė, kai šalia yra sužadintas priemaišinis atomas. Defektų generacijos tūrį apimantis sferos radiusas esant tokiam mechanizmui:

$$R \approx \frac{q_1 q_2 e^2}{\epsilon E_d}, \quad (2.2.3.)$$

čia  $q_1, q_2$  - sąveikaujančių atomų elementariųjų krūvių skaičiai,  $e$  - elektrono krūvis,  $\epsilon$  - medžiagos dielektrinė konstanta,  $E_d$  - defekto susikūrimo energija. Tame tūryje yra  $n$  mazginių atomų, defekto kūrimosi tikimybė yra  $n \cdot a_j$ , čia  $G^j$ -tojo vidinio apvalkalo atskiro atomo jonizacijos tikimybė yra  $n \sum_j \sigma_j$ , čia  $\sigma_j$  -  $j$ -tojo vidinio apvalkalo atskiro atomo jonizacijos tikimybė (skerspjūvis)

Tam, kad sukurti izoliuotą  $V$ , galima apšvitinti  $\sim 1-3$  MeV energijos elektronais žemoje temperatūroje [6]. Elektrono masė maža, lyginant su atomų, todėl radiaciniai pažeidimai gaunami patys paprasčiausi. Žema temperatūra reikalinga produktų užšaldymui. Elektroninis švitinimas patogus tuo, jog medžiaga neužteršiama priemaišomis.





2.2.1. Pav. Vakansijų krūvio būsenos ir lygmenys draustinėje juostoje [6]

Izoliuota  $V$  buvo stebėta EPR (Elektronų Paramagnetinis Rezonansas) metodu. Stebint įkrautų būsenų spektrą, nustatyta, jog  $V$  Si draustinėje juostoje kuria penkias būsenas ( $V^{2+}$ ,  $V^+$ ,  $V^0$ ,  $V^-$ ,  $V^{2-}$ , ) atitinkančias energijos lygmenys (2.2.1 pav.). Iš gardelės relaksacijų stebėta, jog skirtingi nutraukti ryšiai rekonstruojasi skirtingai, priklausomai nuo elektrinio krūvio. Rekonstrukcijos ypač pasireiškia, kai  $V$  sukaupia elektronus, kurie užpildo daugiau galimų būsenų draustinėje juostoje. Pirmiausiai atsiskiria lygmenys be atomų išsistumdymo (veikia Kulono stūma kiekvienam naujai pridėtam elektronui), ir lygmenų pažemėjimas dėl atomų išsistumdymo ir energijos išlošimo. Tiksliai nustatytos energijos parodytos paveiksle eV, rodo efektą, kuomet lygmenų pažemėjimas vyksta priešinga linkme: efektas žinomas "neigiamu-U" pavadinimu, kuomet sekantis elektronas susiriša su  $V^{2+}$  stipriau nei pirmasis (šerdinis). Šis fenomenas yra gardelės stambios relaksacijos pasekmė, kuomet relaksuojant energijos išlošimas didesnis nei Kulono stūmos energija. Daugelio užkrautų būsenų egzistavimas ir jas atitinkančios skirtingos gardelių relaksacijos reiškia, jog  $V$  difuzija ir sąveika su kitais įkrautais defektais gali priklausyti nuo krūvio. Krūvio pagavimas defektais gali sukelti vibracinės energijos susiurbimą į defektą taip, kad atomai stumiami labiau - pasireiškia rekombinacinis migracijos skatinimas.

$V$  spektrai išnyksta po 15 min. atkaitinimo n-tipo  $\sim 70$  K temperatūroje, p-tipo  $\sim 150$  K,  $\sim 200$  K - didelės varžos medžiagoje (Si savasis). Naujų spektrų atsiradimas rodo, jog  $V$  poruojasi su kitais defektais, t.y. jos difunduoja pakankamai toli. Iš  $V$  kinetikos nustatytos migracijos aktyvacijos energijos:  $0,18 \pm 0,02$  eV n-tipo,  $0,45 \pm 0,04$  eV didelės varžos ir  $0,32 \pm$

0,02 eV p-tipo medžiagose. Migracija ir pagavimas gali vykti ir 4,2 K temperatūroje jei yra optinis žadinimas ar elektronų spinduliuote.  $V$  - defektas, turintis padidintą neterminės rekombinacijos tikimybę. Pagrindinis įnašas į migracinį barjerą yra iš  $V$  formavimosi energijos ir tik nedidelė dalis iš terminės aktyvacijos (difuzija didelėse temperatūrose).

Tarpmazginis  $O_i$  įlenda į  $V$  ir stipriai susiriša su dviem artimiausiais kaimynais. Likę 2 nesujungti ryšiai formuoja akceptorinį lygmenį  $E_C - 0,17$  eV. Pagautos W-grupės elementų - P, As, Sb -, kuria pavienius akceptorinius lygmenis  $E_C - 0,43$ ,  $E_C - 0,47$ ,  $E_C - 0,44$ eV (paeiliui). Poruojantis  $V$ , jos gali sukurti 4 būsenas draustinėje juostoje, priklausomai nuo to, kiek elektronų yra pagavusios:  $(VV)^+$ ,  $(VV)^0$ ,  $(VV)^-$ ,  $(VV)^{2-}$ , tiek donorines  $E_V + 0,21$ , tiek akceptorines  $E_C - 0,23$  eV.  $V$ , pagavusios H atomus nesunkiai išskiriamos EPR tyrimais dėl ryškiai išsiskiriančių kompleksų  $VH$ ,  $VH_2$ ,  $VH_3$  ir  $VH_4$  vibracinių modų. Visi kompleksai išskyrus  $VH_4$  turi nutrauktus ryšius, todėl turėtų būti elektriškai aktyvūs. Tikimasi, jog dėl ryšių panašumo  $VH_2$  turėtų elektriškai elgtis panašiai, kaip  $VO$ .

Visais atvejais I pagautas priemaišų yra riboto stabilumo, tačiau tam tikrame temperatūros intervale kompleksas migruoja vientisas, kol nebūna pagautas kokio nors kito defekto. Su kiekvienu defektu Si sąveikauja skirtingai ir keliant temperatūrą peršoka prie stabilesnius ryšius kuriančių defektų. Ilgai manyta, jog migracijos aktyvacijos energijos vertės daug didesnės, tačiau vėliau, atsižvelgta, jog defektai dažnai būna pagauti kitų defektinių centrų. Išskaičius šį faktą, perskaičiuotos aktyvacijos vertės gautos mažesnės.

Paprastai manoma, jog tarp anihilacijos ir Frenkelio porų išsiskyrimo vyksta lygiavertė konkurencija. Visgi, naudojant rentgeno difuzinės sklaidos techniką, Erhart'as ir Zillingen'as priėjo išvadą, jog tik nedidelė dalis porų išsiskiria, o net artimos Frenkelio poros, matyt elektriškai neaktyvios, išsilaiko, ir atsikaitina lėtai kambario temperatūroje [6].

Įvairiose medžiagose susikūrę defektai skirtingai veikia laidumą, pavyzdžiui kai jie būna akceptoriniai, kristalas tampa laidumo tipo,  $n$  laidumo tipo Si dėl to padidėja varža. Susikūrę defektai paprastai turi keletą energinių lygmenų, priklausomai nuo sąlygų jie elgiasi kaip donorai ar kaip akceptoriniai bei rekombinacijos ar prilipimo centrai. Jiems esant judris taip pat sumažėja dėl padidėjusios sklaidos [7,8].

Nejonizuoto defekto kūrimosi energija paprastai yra didesnė nei elektrono pagavimo iš laidumo juostos į lokalinį to defekto lygmenį, t.y. defekto susikūrimas dalyvaujant laidumo juostos elektronui, pagaunamam defektinio lygmens jam besikuriant energetiškai yra nenaudingas procesas (bet gali vykti dėl savųjų pusiausvirųjų defektų didėjančios entropijos),

o vykstant tarpmazginio atomo anihiliacijai su vakansija, turinčia elektroną, su elektrono šuoliu į laidumo juostą, išsiskiria energija. Kai laidumas mažėja dėl kompensuojančių defektų atsiradimo, kurie kuriasi dėl atsiradusių krūvininkų, reiškinys vadinamas savikompensacija. Tokie pertekliniai elektronai gali atsirasti jonizuojant donorines priemaišas, gardelę ar injektuojant iš kontaktų. Veikiant jonizuojančiąja spinduliuote, turi didėti savųjų defektų koncentracija dėl terminių defektų kūrimosi mechanizmų dalyvaujant sužadintiems elektronams. Galima netgi fotolaidumo savikompensacija.

Taip pat gali būti stebima laidumo tipo konversija  $n\text{-Si} \rightarrow p\text{-Si}$  kaip po elektroninio, taip ir po protoninio apšvitinimo [9]. Ypač stipriai tai pasireiškia po terminio apdirbimo. Ryški koreliacija yra tarp atsirandančių kristale judrių vakansijų ir akceptorinių centrų kūrimosi. Po 200-220°C mažavaržio bandinio atkaitinimo pastebėtas  $p$  laidumo tipas. 250-300°C temperatūros atkaitinimas dar padidina skylių tankį. Yra žinoma, jog prie 200-220°C atsikaitina trivakansijos, o esant 250-350°C -divakansijos ir A-centrai. Dėl to kristale atsiranda judrių vakansijų. Toks laidumo tipo pasikeitimas leidžia atmesti, kaip nepasireiškiančią visą defektų klasę, susijusią su tarpmazginiais atomais. Šie defektai, kaip taisyklė, elgiasi kaip donoriniai arba neutralūs centrai. Tenka atsisakyti defektų, kurių sudėtyje yra deguonies, o taip pat dėl temperatūrinio nestabilumo divakansijų, trivakansijų ar tetra vakansijų. Dėl temperatūrinio stabilumo, kaip akceptoriniai, tiktų pentavakansijos (EPR-centras P1), kurios egzistuoja iki 500°C temperatūros. Tačiau pentavakansijos atsiranda, esant didesnėms jonų ar neutronų dozėms. Taip pat žinoma, jog jos draustinių energinių juostų tarpe sukuria  $E_V + 0,44$  eV energijos gilų lygmenį. Tyrimai rodo, jog akceptorinių centrų egzistavimo sąlygomis (bent aukštesnėje nei 400°C temperatūroje) draustinės juostos apatinėje dalyje nėra gilių lygmenų.

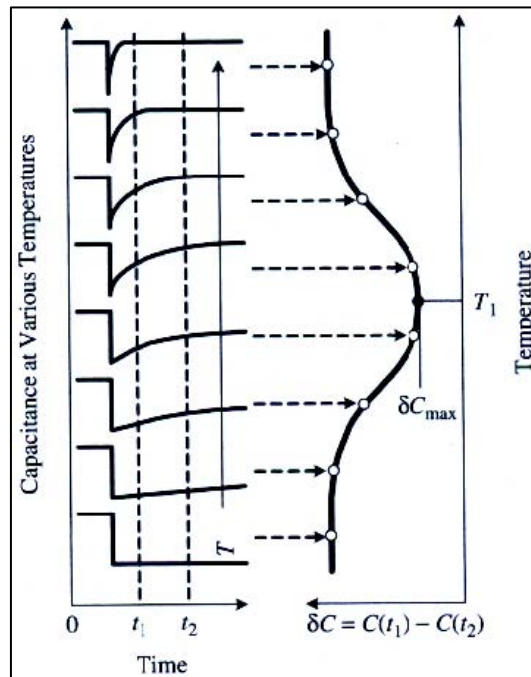
### **3. Defektų identifikavimo metodai**

#### **3.1. Giliųjų lygmenų trumpalaikė spektroskopija (DLTS).**

Giliųjų lygmenų trumpalaikė spektroskopija (DLTS) naudojama silicio juostos plyšiuose esančių energijų iš naujo susijungusių centrų koncentracijai ir tapatumui nustatyti. Norint atlikti matavimus, reikia pasigaminti Schottky diodus. Matavimų metu diodas laikomas stabiliai, nukreiptas prieš spindulį, ir yra veikiamas sumažintu pulsuojančiu spinduliu. Šių spindulių dydis gali būti naudojamas parenkant zondavimo gylį, nes vietos krūvio srities plotis diode keičiasi nuo taikomos įtampos. Kai diodas nukreiptas prieš spindulį, vietos krūvio sritis yra plačiausia ir eikvoja daugumą pernešėjų. Pulso momentu, dauguma pernešėjų pasislenka į prieš tai buvusią išseikvotą sritį ir pakeliui pripildo kai kurias gaudyklės. Kai tik diodas grįžta į priešingo nukrypimo padėtį, dauguma laisvų pernešėjų greitai pajuda iš vietos krūvio srities. Gaudyklės atpalaiduoja prieš tai sugautus daugumą pernešėjų ir bendra užimtų gaudyklių koncentracija eksponentiškai krinta tam tikrą, pastovų kiekvienai gaudyklės rūšiai laiką. Tokia emisija gali būti nustatyta tikrinant trumpalaikį diodo talpinės varžos pasikeitimą. Talpinės varžos smukimo laiko konstanta sumažėja kartu su padidėjusia temperatūra, todėl kai kurios gaudyklės gali pernelyg greitai ištuštėti, ir todėl jų neįmanoma išmatuoti esant kambario temperatūrai. Dėl šios priežasties DLTS duomenys renkami temperatūrų intervale – nuo kambario temperatūros iki kriogeninės temperatūros.

DLTS spektro rinkimo metu parenkamas rodiklių langas, kuris nustato du laiko taškus trumpalaikiame smukime, ir kuriuose matuojama talpinė varža. Talpinių varžų skirtumų kreivė šiuose dviejuose laiko taškuose temperatūros atžvilgiu ir yra DLTS spektras. Esant aukštomis temperatūroms, gaudyklė gali ištuštėti per greitai po to, kai impulsas buvo pamatuotas. Taigi smukimas vyksta prieš rodiklių langą, todėl talpinės varžos pasikeitimas yra lygus nuliui. Esant pakankamai žemoms temperatūroms gaudyklės ištuštėja pernelyg lėtai, kad talpinės varžos pasikeitimas būtų užfiksuotas rodiklių lange, todėl ir šiuo atveju talpinės varžos pasikeitimas yra lygus nuliui. Tarp aukštų ir žemų temperatūrų išmatuojami talpinės varžos pasikeitimai nustatomi rodiklių lange. Kaip parodyta 3.1.1. pav. ši talpinės varžos skirtumų kreivė sukelia DLTS spektrą.

Viršūnių vietos DLTS spektre yra susijusios gaudyklės tapatumu, o viršūnės aukštis susijęs su gaudyklių koncentracija.[10]



3.1.1 pav. Rodiklių lango sąvokos, naudojamos DLTS, iliustracija. Du laikai,  $t_1$  ir  $t_2$  pasirinkti rodiklių langui apibrėžti. Gaudyklės tuštėjimo laikinumas turi laiko konstantą, kuri kinta priklausomai nuo temperatūros. Talpinės varžos pasikeitimas nuo  $t_1$  iki  $t_2$  šiam laikotarpiui,  $\Delta C$ , brėžia kreivę temperatūros atžvilgiu, kad sudarytų DLTS spektrą.

### 3.2. Antrinė jonų masės spektroskopija (SIMS)

Antrinė jonų masės spektroskopija (SIMS) tai metodas, naudojamas elementų, esančių mėginiuose, cheminei identifikacijai ir koncentracijai nustatyti. Į mėginį trenkiasi jonų spindulys, kad destruktiviai pašalintų medžiagą. Kai medžiaga pašalinama, gaunami duomenys – koncentracijos profilis su gyliu. Išmesti iš mėginio atomai yra analizuojami su masės spektrometru ir identifikuojami pagal masės ir krūvio santykį. Atomų koncentracija mėginiuose yra susijusi su duoto elemento aptikimo skaičiumi per laiko vienetą. Neutralūs atomai negali būti aptinkami, ir ne visi išmesti atomai gali būti jonizuoti. Be to, duotas elementas gali jonizuoti skirtinguose lygiuose priklausomai nuo jo esamos matricos. Dėl šių priežasčių reikia žinomų standartų, kad gauti tikslias koncentracijas skaičiuodami iš laiko duomenų. Pavyzdžiui, geležies kiekio nustatymui silicio mėginyje reikia palyginimo su standartiniu silicio mėginiu, kur yra žinomas geležies priemaišų lygis.[10]

### 3.3. Furje transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopija (FT-IR)

#### 3.3.1 IR dažnių diapazono ir spektro aprašymas

Infraraudonųjų (IR) spindulių spektroskopija yra viena dažniausiai naudojamų spektroskopijos technikų, kurią naudoja organinės ir neorganinės chemijos specialistai. Kalbant paprasčiau, tai yra matuojamas medžiagos pavyzdžio, esančio IR spindulio kelyje, skirtingų dažnių IR spindulių absorbcijos matavimas. Pagrindinė IR spektroskopinės analizės užduotis yra nustatyti šio pavyzdžio chemines sudedamąsias grupes. Skirtingų sudedamųjų grupių absorbcijos savybės yra skirtingos esant IR spinduliavimui. Panaudojant įvairius bandinių priedus, IR spektrometrai gali būti naudojami tyrinėjant įvairius bandinių tipus, tokius kaip dujos, skysčiai ir kietos medžiagos. Taip pat IR spektroskopija yra svarbus ir populiarus metodas nustatant struktūrinę sandarą ir sudėtines medžiagas.

Infraraudonųjų spindulių spinduliuotė apima elektromagnetinio spektro bangas, kurių bangos skaičius yra nuo 13.000 iki  $10\text{ cm}^{-1}$ , arba bangos ilgis yra nuo 0.78 iki  $1000\ \mu\text{m}$ . Matomumo zonoje ji baigiasi ties raudonos spalvos pabaiga prie aukštų dažnių, o mikro bangų zonoje prie žemų dažnių.

IR spindulių sugertis (absorbcija) yra išreiškiama arba bangos skaičiumi arba bangos ilgiu.

Bangos skaičius parodo kiek yra bangų tam tikrame ilgyje. Taip pat bangos skaičius yra tiesiogiai proporcingas dažniui, atitinkamai absorbuojama IR energija. Bangos skaičiaus matavimo vienetas ( $\text{cm}^{-1}$ , atvirkštinis centimetras) yra dažniau naudojamas naujesniuose IR prietaisuose, kurių matavimas yra linijinis  $\text{cm}^{-1}$  skalėje. Palyginimui, bangos ilgis yra atvirkščiai proporcingas dažniui ir jo skleidžiamai energijai. Šiuo metu rekomenduotinas bangos ilgio matavimo vienetas yra  $\mu\text{m}$  (mikrometras), bet senesnėje literatūroje vietomis yra naudojamas  $\mu$  (mikronas).

Bangos skaičius ir bangos ilgis gali būti perskaičiuojami pagal tokią formulę:

$$\nu(\text{cm}^{-1}) = \frac{1}{\lambda(\mu\text{m})} \cdot 10^4 \quad (3.3.1.1.)$$

IR sugerties informaciją galima pateikti grafike, kur x-ašyje nurodomas bangos ilgis ar bangos skaičius, o absorbcijos intensyvumas ar pralaidumas procentas y-ašyje (3.3.2.1. pav.).

Pralaidumas  $T$ , yra santykis spinduliuojamos energijos kiekis ( $I$ ) perduotas medžiagai su spinduliuojamos energijos kiekiu krintančiu ant medžiagos ( $I_0$ ). Absorbavimas ( $A$ ) yra atvirkštinio pralaidumo ( $T$ ) dydžio dešimtainis logaritmas.

$$A = \log_{10}(1/T) = -\log_{10} T = -\log_{10}(I/I_0) \quad (3.3.1.2.)$$

IR diapazonas yra dalinamas į tris mažesnes sritis: Artimoji sritis, Vidurinė sritis ir Tolimoji sritis.

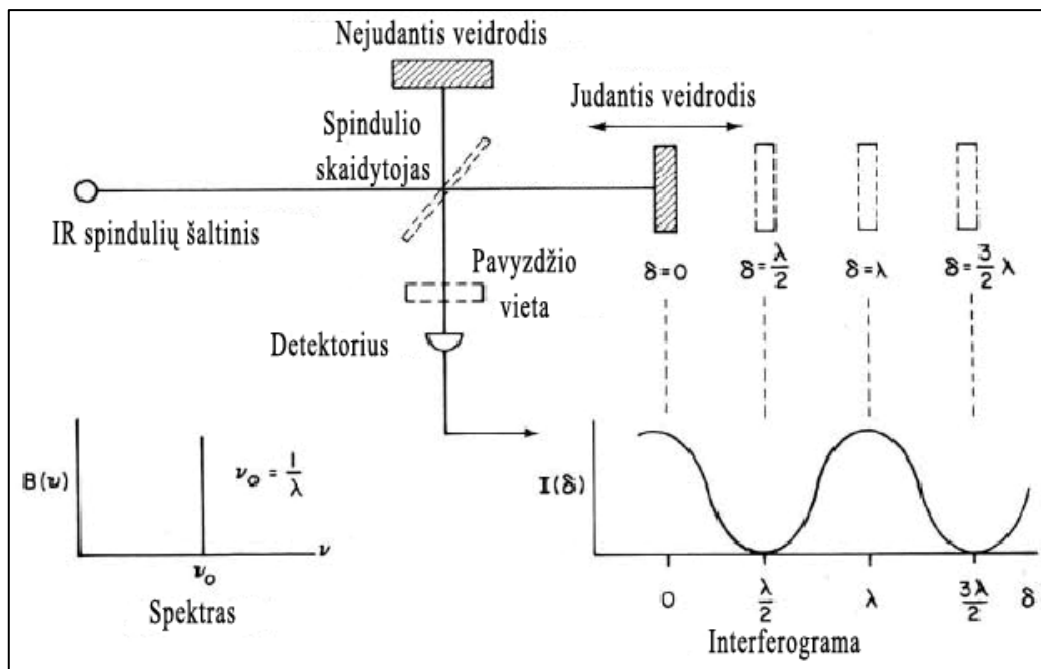
	Artimoji sritis	Vidurinė sritis	Tolimoji sritis
Bangos skaičius	13000 – 4000 $\text{cm}^{-1}$	4000 – 200 $\text{cm}^{-1}$	200 – 10 $\text{cm}^{-1}$
Bangos ilgis	0,78 – 2,5 $\mu\text{m}$	2,5 – 50 $\mu\text{m}$	50 – 1000 $\mu\text{m}$

Darbas buvo atliktas viduriniajame IR bangų diapazonui, esančiam nuo 4000 iki 400  $\text{cm}^{-1}$  (2.5 iki 25  $\mu\text{m}$ ). Tolimoji IR sritis reikalauja specialių optinių medžiagų ir prietaisų. Ji naudojama tyrinėjant organines, neorganines, metalo neturinčias medžiagas, įskaitant ir sunkiuosius atomus (masės numeris virš 19). Taip pat suteikia naudingos informacijos atliekant struktūrines studijas, tokias kaip bandinių struktūros ir molekulinės sandaros pokyčiai. Artimosios srities spektroskopijai visai nereikia pasiruošimo arba jis yra minimalus. Ji leidžia atlikti bandinio didelio greičio kiekybinę analizę nesunaudojant ir nesugadinant mėginio. Šie instrumentai beveik visuomet gali būti suderinti su UV-matomu spektrometru ir prijungti prie optinio įrenginio, skirtu nuotoliniams tyrinėjimams. Artimosios IR srities spektroskopija populiarėja, ypač procesų valdymo srityse.

Paprastai tariant, IR spektras yra gaunamas nustatant perduodamo (ar absorbuojamo) intensyvumo pokyčius, naudojant dažnį. Dauguma komercinių instrumentų atskiria ir matuoja IR spinduliavimą naudodami dispersinius spektrometrus ar Furje transformacijos spektrometrus.[11]

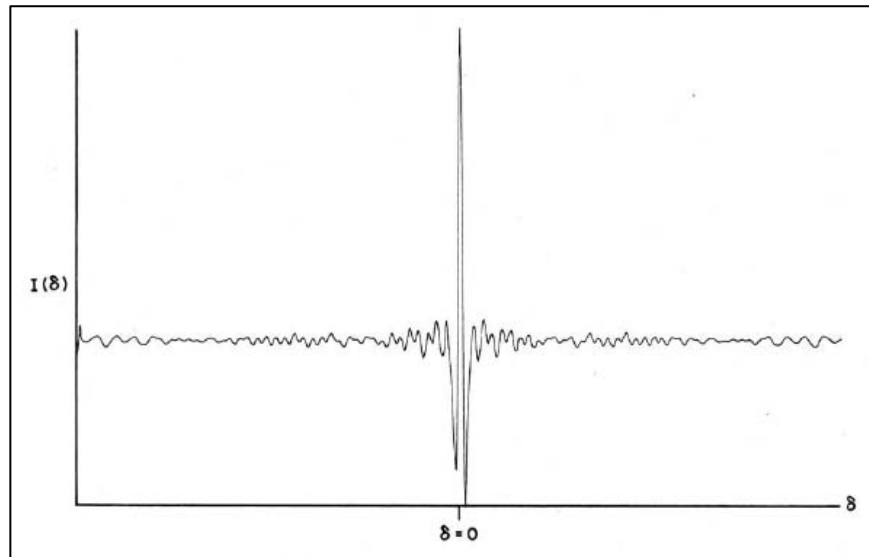
Furje transformacijos infraraudonųjų spindulių spektroskopija (FT-IR) – tai bekontaktė optinė perdavimo technika, naudojama smulkioms priemaišoms silicyje atpažinti ir nustatyti jų kiekį. FT-IR spektrometrai naudoja Maikelsono interferometrą su infraraudonųjų spindulių šaltiniu.





3.3.1.1. pav FTIR spektrometro schema

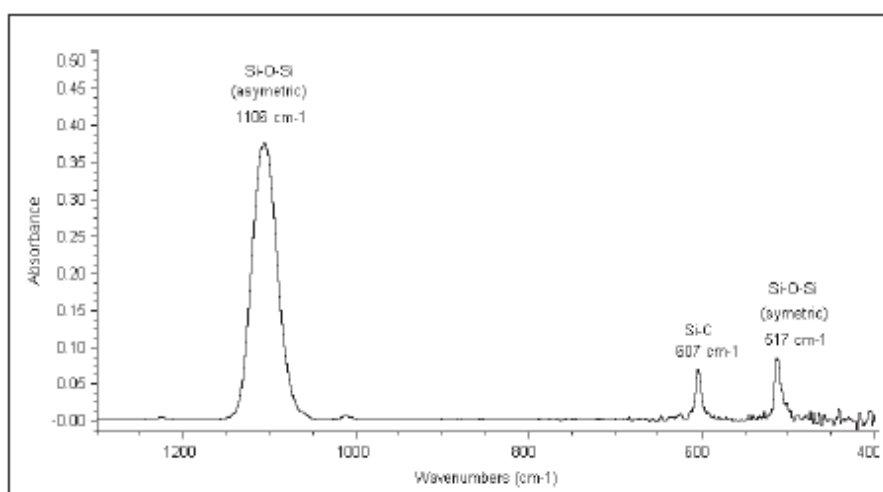
3.3.1.1. paveiksle matomas Maikelsono interferometras. Veidrodžio padėtis interferometre moduluojamas atgal ir į priekį nedideliu atstumu, kad būtų sukurta interferograma pamatuotame šviesos perdavime per mėginio kamerą. Ištinisio spektro infraraudonųjų spindulių šaltinio interferograma pavaizduota 2 paveiksle. Ryškiausiai spektriniai duomenys matomi spektro galuose, kaip atsakas į didžiausią veidrodžio poslinkį. Furje interferogramos pasikeitimas suteikia spektrui informacijos apie šaltinį ir visa kita, kas yra spindulio kelyje. Spektras yra paverčiamas į procentinį perdavimą, lyginant spektrą su spindulio kelyje esančių mėginių, su spektru išgautu esant tuščiai kamerai. Absorbuotas spektras apskaičiuojamas imant neigiamą procentinio perdavimo duomenų logaritmą. Švaraus (be priemaišų) referencinio silicio etalono atėmimas (išminusavimas) duoda absorbuojamą spektrą mėginiui, kuriame yra tik viršūnės, atitinkančios smulkias priemaišas esant charakteringiems bangos ilgiams. Viršūnės aukštis gali būti naudojamas apskaičiuojant priemaišų koncentraciją [10]



3.3.1.2 pav. Tipinė infraraudonųjų spindulių kaitinamojo siūlo pavyzdžio interferograma. Intensyvumas ( $I$ ) svyruoja dėl veidrodžio perkėlimo ( $\delta$ ). Visi dažniai konstruktyviai įsiterpia esant nuliniam poslinkiui, tai lemia didelį prasiveržimą centre. Didžiausios skiriamosios gebos spektro duomenys yra gaunami kai veidrodžio poslinkis yra didžiausiais.

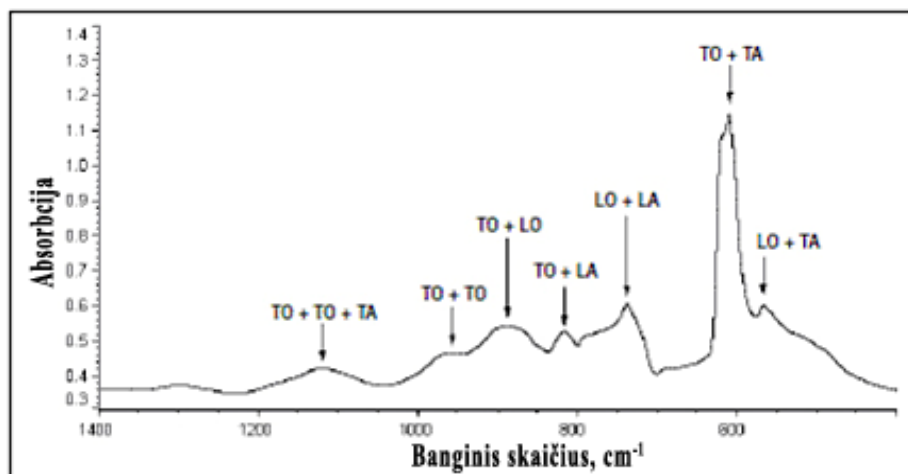
### 3.3.2 FT-IR spektroskopijos taikymas silicyje esančių $O_i$ ir $C_s$ analizei [12]

Silicio atomai gardelės struktūroje suformuoja jungtis su anglies atomais (Si-C) ir su deguonies atomais (Si-O-Si). Infraraudonųjų spindulių spektrometrija naudoja IR spindulius (bangos ilgis 2-25  $\mu\text{m}$ ) mėginio apšvitinimui. Silicis esant tokiam bangos ilgiui yra skaidrus, ir kai IR spinduliai praeina mėginį, cheminės grandinės rezonuoja pagal bangos ilgį ir gali absorbuoti dalį IR spindulių. Absorbuotos šviesos dalis yra proporcinga atomų, kurie suformavo grandinę, koncentracijai. Ir todėl ji yra išmatuojama, kad būtų nustatytas koncentracijos dydis. IR absorbcinės smailės stebimos ties:  $O_i$  absorbcija pastebima  $1107\text{ cm}^{-1}$ , o  $C_s$  ties–  $605\text{ cm}^{-1}$ .



3.3.2.1.Pav. Spektas, rodantis  $O_i$  ir  $C_s$  absorbciją silicyje. FZ-Si fononų spektras buvo pašalintas, kad aiškiau matytųsi linijos apie dominančias viršūnes.

Silicio kristale taip pat vyksta gardelės fononų sukeltos absorbcijos (Si-Si) srityse. Jos buvo ištirtos tiriant FZ silicio spektrą. FZ silicis – tai toks silicis, iš kurio buvo pašalintos (arba ženkliai sumažintos)  $O_i$  ir  $C_s$  priemaišos. Tokios absorbcijos gali būti naudojamos nustatant mėginio storį (3.3.2.2. pav.).



3.3.2.2. FZ silicio mėginio spektras. Išskirtos smailės - gardelės vibracijos (fononai) silicyje. TA - skersinis akustinis, TO - skersinis optinis, LA - išilginis akustinis ir LO - išilginis optinis.

FZ silicio tyrimas yra svarbus, nes  $C_s$  absorbcija įvyksta tose vietose, kur ir stipriausios absorbcijos iš silicio gardelės. Silicio TO + TA fononai (kartais vadinami „dviejų fononų ryšiu“) yra susikaupę  $630\text{ cm}^{-1}$  vietoje ir sukelia sunkumų matuojant, nes šioje spektro vietoje signalo į triukšmą koeficientas yra žemesnis, ir anglies koncentracija taip pat yra palyginti žema. Fononai, esantys deguonies srityje (TO + TO + TA, arba „trijų fononų ryšys“), esantys  $1118\text{ cm}^{-1}$  vietoje, yra žymiai mažiau intensyvūs. Ši absorbcija duoda netiesinę liniją žemiau  $O_i$  viršūnės ir yra pašalinama naudojant FZ silicio ryšius (3.3.2.3. pav.).

3.3.2.1. Lentelė. Silicio fononų energijos [13]

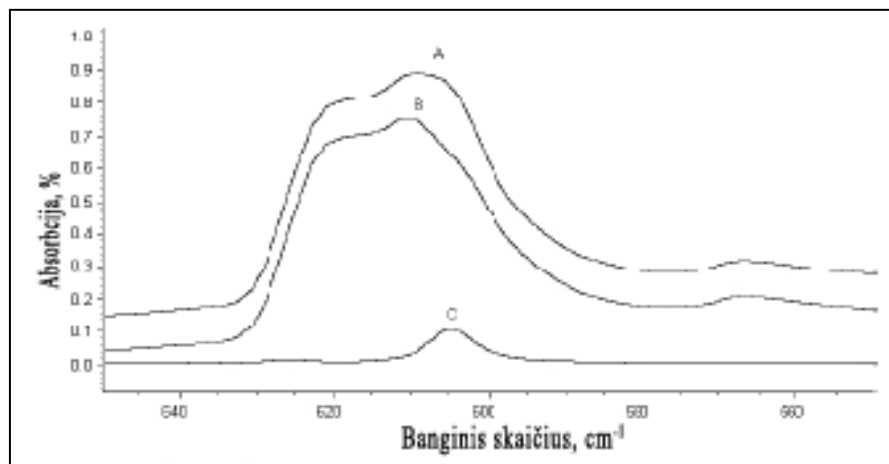
Fononai	Nat.Si	Natūralaus Si	Si 28	Si 29	Si 30
LO+TA	566	566.4	569.1	559	548.1
TO+TA	610	610.8	612	601.6	591.6
LO+LA	739	739.1	741	728.3	715.6
TO+LA	819	819	817.8	804.3	791
TO+LO	886	888	890	873.5	859
TO+TO	960	959	962	944	930
2TO+TA	1118	1119	1122.4	nėra	nėra
2TO+LO	1299	1299.5	1302	1278.3	1253.5
3TO	1448	1448.8	1450	1425.1	1398.6

Apačioje esantis Bero dėsnis išreiškia santykį tarp koncentracijos, mėginio storio ir absorbcijos:

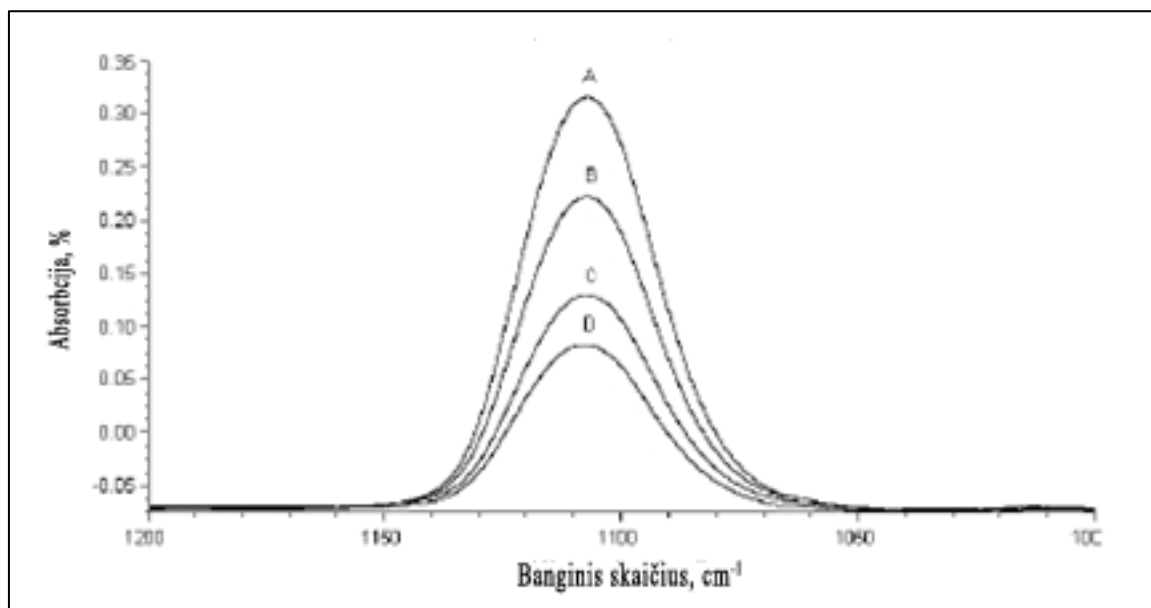
$$A = a \cdot b \cdot c,$$

kur: A - išmatuota absorbcija, a - konkretaus ryšio absorbcija, b - mėginio storis, c - priemaišų koncentracija.

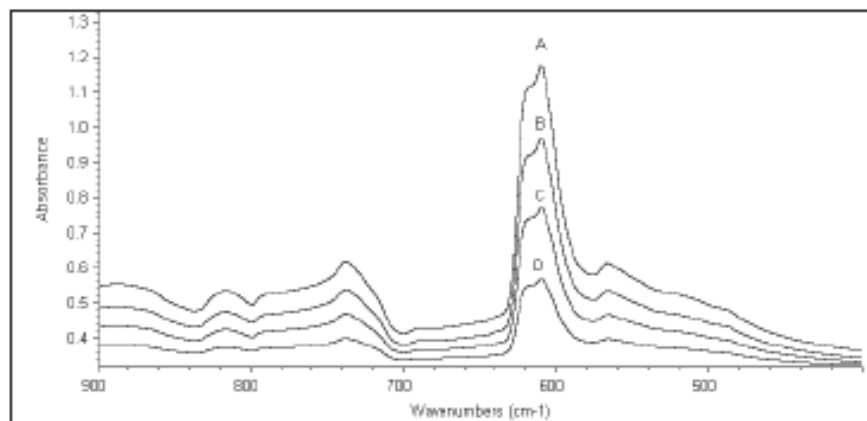
Ši lygtis rodo, kad egzistuoja linijinis ryšys tarp koncentracijos ir absorbcijos (3.3.2.4. pav.) esant žinomam storiui.



3.3.2.3. pav. Silicio spektras tose vietose, kur vyksta absorbcija dėl  $O_i$ : A) CZ silicis; B) FZ silicis su mažesniu kiekiu deguonies nei galima nustatyti; C) skirtuminis spektras, parodantis deguonies absorbciją, be silicio fononų.



3.3.2.4. pav. O<sub>i</sub> viršūnės spektras esant įvairiam koncentracijos lygiui.



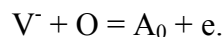
3.3.2.5. pav. Įvairaus storio silicio mėginių spektras: A) 2.00 mm; B) 1.50 mm; C) 1.00 mm; D) 0.50 mm.

#### **4. Defektų reakcijos ir defektų identifikavimas**

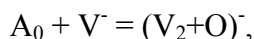
Defektų įvairovė, priklausanti nuo spinduliuojamų dalelių gali būti nuo paprasčiausių –  $V$  ir  $I$  (apspinduliuojant elektronais su mažesne nei 10 MeV energija) iki defektinių klasterių (po jonų ar neutronų poveikio) [9]. Tiesioginė  $V$  ir  $I$  anihiliacija nėra dominuojantis procesas:  $V$  ir  $I$  sąveikauja su bet kokia priemaiša ar kitu kristalinės gardelės netobulumu.

Vykstant švitinimui, kuriasi taškiniai defektai, kurie reaguoja tarpusavyje į stambesnius junginius. Atliekant eksperimentus įvairiose temperatūrose galima identifikuoti junginių terminius stabilumus bei atskirti, kokie yra jų indėliai matuojamiems parametrams. Vienas iš gerai žinomų defektų -  $IC_iO_i$  (Si atomas pagautas didesnėje  $C_iO_i$  sankaupe, žymimas C4) nustatomas IR sugertyje [14]. Žymėjimas su indeksu "i" reiškia tarpmazginę atomo padėtį, o indeksas "s" - reiškia mazginę (angl. interstitial, substitutional). Tokio defekto stabilumas išsilaiko iki 450K.  $C_i$  judrus kambario temperatūroje (KT), susijungia su  $O_i$  ir sudaro C3 defektą:  $C_iO_i$ . Nors jis stabilus iki 450K, kambario temperatūroje jo IR spektrai sunkiai pastebimi taškinių defektų spektriniais atsakai būna siauri, o klasterių – išplitę.

Bandinyje su deguonimi ir anglimi po švitinimo judri vakansija yra pagaunama deguonimi  $O_i$ , formuojasi A centras [15] kuris stabilus iki 600 K. Kuriantis A centrams, vyksta reakcija:



Centras elektriškai neutralus ir gali kvazichemiskai sąveikauti su  $V^-$ :



kurio lygmuo  $E_C - 0,5$  eV. Pastarasis užkrautas neigiamai ir su  $V^-$  toliau neturėtų reaguoti, kaip kad ir E centrai ( $E_C - 0,41$  eV kambario temp.) ar  $V_2$  ( $E_C - 0,39$  eV).  $V^-$  difuzinis suartėjimas iki  $V_2$  taip pat mažai tikėtinas, nors teoriniai skaičiavimai tai leidžia [16]. A centras judrus ir jungiasi į kitą centrą:  $VO + O = VO_2$ , kuris stabilus iki 750 K, didžioji V dalis tampa  $VO_i$  ir  $VO_2$ , kita dalis  $VO_3$ , nes  $VO_2$  – judrus.

Tarpmazginis Si pagaunamas mazgine anglimi ir formuojasi  $C_i$ , kuris jungiasi su deguonimi į centrą C3. Bandinyje, kuriame daug deguonies ir mažai anglies, stebėta 936/cm linija ( $2IO_i$ ), kurios nėra spinduliuojant elektronais. Kuomet dvi vakansijos ir tarpmazgiai kuriami kartu viename klasteryje, jie formuoja stabilią divakansiją ir stabilų, judrų I2. DLTS signalai rodo: 0,17 eV - A centrą (elektronų gaudyklė) ir 0,36 eV centrą  $C_iO$  (skylių gaudyklė). Elektriniuose matavimuose [17] stipriausiai reiškesi A centras (836/cm) ir 865/cm -  $C_iO_i$ .

Silpnesni signalai: 742/cm (deguonies iš  $C_iO_i$ ), 940/cm, 1024/cm ( $IC_iO_i$ ), 960/cm ir 966/cm ( $IC_i$ ), 991/cm ir 998/cm ( $I_3C_iO_i$  ir  $I_2C_iO_i$  atitinkamai), 1012/cm (O dimeras).  $IC_iO_i$  stabilios juostos laikosi iki 150°C, tada atsiranda 3 naujos linijos: 724/cm, 952/cm, 973/cm. 724/cm yra iš deguonies - nustatyta iš skirtingų deguonies izotopų. 952/cm ir 973/cm atsiranda dėl anglies, 865/cm ir 1116/cm iš  $C_iO$ ; ir 940/cm iš  $IC_iO_i$ . Pakėlus temperatūrą iki 250 - 275°C, linijos 724/cm, 952/cm ir 973/cm pasikeičia į 951/cm, 969/cm ir 977/cm. 969/cm - deguonies, 951/cm ir 977 / cm - anglies. 951/cm, 969/cm ir 977/cm išnyksta 300 - 325°C. Šioje temperatūroje VO ir  $C_iO_i$  pradeda atsikaitinti Iš  $IC_iO_i$  pasigamina stabilesni kompleksai. Elektrinė varža išlieka pastovi ir didelė po visų kaitinimų. Fermi lygmuo lieka  $E_g$  viduryje, todėl defektų transformacijos negalimos dėl defekto krūvio pokyčio. Nepanašu, kad  $IC_iO_i$  sugeba difunduoti kaip vientisas kompleksas taip pat nėra požymių, kad  $IC_iO_i$  disocijuotų žemiau 300K. Todėl manoma, kad  $IC_iO_i$  juostų kitimas sąlygotas tik konfigūraciniu pasikeitimu. Ties 200 - 250°C nyksta  $IC_i$  ir didėja  $IC_iO_i$ , nes manoma, kad virš 200°C  $IC_i$  pora yra stabili ir judri t.y. judėdama pasigauna tarpmazginę deguonį [14]. Žemoje temperatūroje IR linijos pasislenka į naujas padėtis: 934/cm ir 1018/cm =  $IC_iO_i$ , 953/cm ir 960/cm =  $IC_i$ , 987/cm ir 993/cm =  $IC_iC_s$ , 830/cm = VO ir 860/cm =  $C_iO_i$  [18]. Šildant, 987/cm ir 993/cm nyksta, atsirandant 945/cm ir 964/cm:  $IC_iC_s$  reaguoja į stambesnius klasterius. Šios linijos priskiriamos  $IC_iC_s + I = I_2C_iC_s$ , nes nustatyta 1,27 eV reakcijos energija, kuri sutampa su ankstesniuose darbuose matuotos PL  $C_iC_s$  linijos neutronais švitintame Si gauta 1,25 eV energija [18].

Si kristaluose su dideliu C kiekiu gali formuotis SiC nanokristalai. IR spektre stebėtos linijos 460, 730, 820 ir 1090/cm. 450 ir 1090 atitinka Si-O-Si vibraciją, o 730 ir 820 atitinkamai amorfinį ir kristalinį SiC [19]. 794 taip pat atitinka SiC fononą (poslinkis dėl dydžio efekta). Bandinyje su C, Si-C ryšiai kuriasi sunkiau, nes C jungiasi su deguonimi ir išlekia kaip CO ar CO<sub>2</sub>, be to, Si-O ryšys gerokai stipresnis nei Si-C. Šiuo atveju, formavosi SiC, nes C išdifunduoti nebuvo leidžiama [19].

Anglis (nepaisant deguonies) yra dažniausia specialiai neįvedinėjama priemaiša silicyje, auginant užima mazginę padėtį (IR spektre ties 605/cm). Švitinant ji šoka į tarpmazgį, kambario temperatūroje greitai migruoja ir jungiasi į  $C_iO_i$  (529, 550, 742, 865, 1116 /cm) bei  $C_iC_s$ .  $C_iC_s$  yra metastabilus centras ir gali būti dviejose būsenose A (594.6, 596.9, 722.4, 872.6, 953 /cm) ir B (540.4, 543.3, 579.8, 640.6, 730.4, 842.4 /cm) [20]. Dėl mažo intensyvumo šios linijos matomos tik kriogeninėse temperatūrose, tačiau linija 544/cm priklausanti  $C_iC_s$  centrui stebėta kambario temperatūroje, taip pat nustatyta, kad  $IC_iC_s$  yra stabilus iki 300°C.



Remiantis defektų reakcijų modeliavimu prieita išvados, kad didinant dozę,  $C_i$ ,  $C_iO_i$  ir  $C_iC_s$  veikia kaip tarpmazgių nusėdimo centrai. Pastebėta, jog  $C_iC_s$  centras yra stipresnis neutronais nei elektronais švitintame silicyje: pirminių defektų (porų) didžioji dalis anihiliuoja ir tik nedidelė dalis reaguoja su kitais defektais, o po apšvitinimo neutronais anihiliacija yra silpnesnė dėl pirminių defektų komponentų didesnio išskyrimo erdvėje.

Neutronais švitintame Si Fermi lygmuo artėja į draustinių juostų vidurį,  $C_iC_s$  gali egzistuoti neutralūs, atitinkantys B konfigūraciją. Nustatytoji 544/cm linija kambario temperatūroje atitiktą kombinaciją iš B konfigūracijos linijų 540.3 ir 543.3, kitur išmatuotų skysto He temperatūroje. Buvo ir mėginimų 540/cm liniją priskirti  $C_iO_i$  kompleksui, nes atkaitinimo elgsena tokia pati, kaip  $C_iO_i$  susijusių defektų, šiuo atveju 544/cm nyksta sparčiau nei 860/cm.

Eksperimente fiksuota linija 943/cm. Atkaitinant jos elgsena panaši į VO (829/cm). Yra žinoma, kad deguonies priemaišos švitinant gerai reaguoja tiek su V, tiek su I.  $C_s$  reaguoja su I virsdama  $C_i$ , o kaip vyksta reakcija su vakansija - dar nėra aišku: klasikiniai skaičiavimai rodo, kad tokia sąjunga negalima, ab-initio - tą leidžia. Literatūroje gausu minimų V kompleksų su kitomis mazginėmis priemaišomis (P, As, Sb, B, Al, Ge, Sn), todėl apšvitinus neutronais, kur gausu V, tikėtina, kad  $C_s$  susijungia su V, todėl linija 943/cm priskiriama  $C_sV$  kompleksui. Silicyje su mažesniu deguonies (sugaudančio V) kiekiu ši linija stebima stipresnė, sustiprindama prielaidą, be to su didesniu deguonies kiekiu linija (kartu su VO) sustiprėja virš 250°C, kuomet yra paleidžiamos V iš stambesnių kompleksų. 943/cm yra gerokai didesnė nei  $C_s$  linija, todėl kyla kita prielaida, kad ši linija yra  $C_iV$  centro, be to,  $C_i$  defektas (922 ir 932 /cm) yra judrus. Visgi turėtų būti tikimasi dviejų linijų iš  $C_iV$ , o čia matoma tik viena. Neatmetama galimybė, jog ši linija yra iš antrosios defektų generacijos:  $I2C_i$ ,  $I2C_iO_i$  [20]. Patikslinta, jog 544/cm susideda iš dviejų 543.5 ir 545.5/cm atitinknčių  $C_iC_s$  ir  $C_iO_i$  [21]. Didesnėms švitinimo dozėms formuojasi defektai su pagautais Si atomais. Atkaitinant juos nustatyta, kad  $IC_i$  ir  $IC_iO_i$  išnyksta ties 150°C nesusiformuojant jokioms naujoms juostoms, o  $C_iC_s$  ir  $IC_iC_s$  išnyksta ties 250°C ir formuoja dvi poras naujų juostų (919 ir 1006; 945 ir 964/cm).

Vakansijos taip pat jungiasi prie anglies defektų:  $C_iC_s+V=C_sC_s$ . Šis krūvio neturintis defektas IR pasireiškia ties 527/cm kambario temperatūroje, ties 160°C jis nyksta [21].

VO yra pagrindinis centras po neutronų apšvitinimo Cz-Si [22]. Atkaitinant ties 200°C, divakansijos yra pagaunamos  $O_i$  ir formuojasi  $V_2O$  (840/cm), VO ir  $V_2O$  anihiliacija vyksta 300-400°C intervale, kartu kuriantis komplikutesniems V ir O kompleksams, dominuojantis jų yra

$\text{VO}_2$ , atsirandantis  $\text{O}_i$  pagaunant judrų A centrą. Šiame komplekse du deguonies atomai dalinasi viena vakansija bei jungiasi su Si kaimynais. Šie defektai gali stiprinti  $\text{O}_i$  difuziją.

Yra žinoma, kad radiacinių defektų tipą lemia švitinimo temperatūra: kai ji žema ( $<170^\circ\text{C}$ ), pagrindiniai vakansiniai defektai yra  $V$ ,  $V_2$  ir  $V_4$ , o esant aukštai ( $>170^\circ\text{C}$ ) -  $V_5$ .

VO maksimalus kiekis švitinant ribojamas difuziškai keliaujančiais I ir susijungiančiais su VO (virsta į  $\text{O}_i$ ). Atlikta detali  $829/\text{cm}$  piko analizė rodo  $840/\text{cm}$  petį didesnių energijų srityje ir silpną absorbciją ties  $919.6/\text{cm}$  po  $200^\circ\text{C}$  pakaitinimo.  $919.6/\text{cm}$  kilmė yra  $\text{VO}_2$  (O-V-O) bistabilumas.  $840/\text{cm}$  atitinka  $V_2\text{O}$ . Šioje temperatūroje V gali klajoti laisvai po kristalą ir galimas pagavimas su VO į  $V_2\text{O}$ , taip pat nyksta A centrai. Kai atkaitinimo temperatūra pasiekia  $400^\circ\text{C}$ , stebima  $\text{VO}_2$  juosta  $889/\text{cm}$ . Didinant atkaitinimo laiką iki 10 val. arba keliant temperatūrą iki  $450^\circ\text{C}$  VO pagaunamas į  $\text{VO}_2$ , t.y.  $\text{VO}+\text{O}_i=\text{O}-\text{V}-\text{O}$  ( $300^\circ\text{C}$ ), o tada O-V-O virsta  $\text{VO}_2$ .  $825/\text{cm}$  juosta atitinka  $V_2\text{O}_2$  kompleksą, atsirandantį neutronais švitintą Si atkaitinant  $300-400^\circ\text{C}$ . Tai VO pagautas kito VO (ties  $300^\circ\text{C}$ ) arba klajojusi V pagauta O-V-O ( $400-450^\circ\text{C}$ ). Kai atkaitinimo temperatūra pasiekama  $500-550^\circ\text{C}$ , lieka tik dvi sugerties linijos  $825$  ( $V_2\text{O}_2$ ) ir  $834$  ( $V_3\text{O}_2$ ), bei grupelė  $902$  ( $\text{VO}_3$ ),  $928$ ,  $958$ ,  $980$  ( $\text{VO}_4$ ). Šioje temperatūroje  $\text{O}_i$  difuzija ypač sparti, todėl  $V_2\text{O}_2$  ir  $V_3\text{O}_2$  tampa stambesnių deguonies klasterių užuomazgomis.

Po švitinimo didesne doze, po atkaitinimo  $400-450^\circ\text{C}$ ,  $V_3\text{O}_2$  ir  $\text{VO}_2$  juostos nyksta, o pagrindinė sugertis lieka  $825$  ir  $919.6/\text{cm}$ . Oi atomai pagauti į O-V-O nesitransformuoja į  $\text{VO}_2$ . VO, A centrai,  $\text{O}_i$  ir V transformuojasi į  $V_2\text{O}_2$  [22].

Kiti autoriai [23] VO nykstant ties  $300^\circ\text{C}$  stebi formuojantis  $\text{VO}_2$ ,  $889/\text{cm}$  (kambario temp. arba  $895.5$  ties  $15\text{ K}$ ). Nustatyta, kad  $\text{VO}_2$  vienoje iš metastabilių būsenų ( $\text{VO}_2^*$ ) yra mobilus. Tą būseną atitinka  $928$  ir  $1004\text{ cm}^{-1}$ . Perėjimas iš  $\text{VO}_2^*$  į  $\text{VO}_2$  prasideda ties  $250^\circ\text{C}$ , o pusiausvyra pasiekama ties  $300^\circ\text{C}$ . Staigiai šaldant galima pasiekti, kad kambario temperatūroje defektas liktų naujoje būsenoje.  $\text{VO}_2^*$  yra elektriškai aktyvus ir gali būti neigiamoje arba neutralioje būsenoje [22].

Atlikta defektų inžinerija stengiantis sukurti Si kuo daugiau deguonies dimerų [24]. Motyvacija tokia: vienišas deguonis silicyje - neturalus, dimeras - taip pat. Problemos atsiranda apšvitinus, kai kuriasi vakansijos, kurios reaguoja su deguonimi:  $\text{V}+\text{O}=\text{VO}$  (neutralus) o tada  $\text{VO}+\text{V}=\text{V}_2\text{O}$  (užkrautas, todėl nepageidaujamas). Jei Si yra dimerizuotas, vyksta reakcijos:  $\text{V}+\text{O}_2=\text{VO}_2$  (neutralus),  $\text{V}+\text{VO}_2=\text{V}_2\text{O}_2$  (tikimasi, kad šis, nors ir turi draustinių juostų tarpe lygmenis, pastarieji nėra tokie "nesėkmingi", kaip  $\text{V}_2\text{O}$ ). Dimerizacijai pasiūlytas metodas: švitinti  $\text{Co}^{60}$   $\gamma$  spinduliais  $350^\circ\text{C}$  temperatūroje ( $\text{V}+\text{O}=\text{VO}$ ;  $\text{VO}+\text{O}=\text{VO}_2$ ;  $\text{VO}_2+\text{I}=\text{O}_2$ ), deja kuriasi

papildomai daug kitų defektų, dėl kurių nepavyksta diodų pilnai nuskurdinti ir tik ~4%  $O_i$  tokiu būdu transformuojasi į  $O_{2i}$  (didinant dozę - dimerų tankis sotinasi), metodas pavadintas nepatikimu [24]

Nustatant deguoninių defektų spektro priklausomybę nuo švitinimo dozės, palyginti sugerties koeficientai po švitinimo didelėmis ( $10^{19}$  ir  $4.5 \cdot 10^{16}$  n/cm<sup>2</sup>) dozėmis, po atkaitinimo 650°C temperatūroje [25]. Toks dozės pasikeitimas iš esmės pakeičia spektrinių pikų padėtis, jų skaičių ir intensyvumą, nusakantis, jog kuriasi skirtingi deguoniniai defektai: A centrai virsta sudėtingesniais kompleksais iš kelių taškinių defektų. n-Si po švitinimo mažomis dozėmis dominuoja vakansijų sancaupos, didelėms - tarpmazgių. A centrų atkaitinimas (300°C) neatkuria pradinės  $O_i$  koncentracijos [25].

Jei švitinant tūryje kuriamos vakansijos, tai jos atsiranda kartu su tarpmazgiais. Darant radiacijai atsparius detektorius gausiai įterpiamas deguonis, kuris neišvengiamai reaguoja su tarpmazgiais. Yra žinoma, kad  $O_i$  pagauna I į kompleksą  $IO_i$ , stabilų žemesnėje nei 300K. Pastarasis defektas gali pagauti dar vieną I, formuojant  $I_2O_i$ . Nors tai atrasta jau daugiau nei 50 metų, tai vis dar aktualu. Viename iš populiariesnių dvigubų termodonorų modelių šerdyje yra  $IO_{2i}$  [26]. Cz-Si su mažu anglies kiekiu ir padidintu deguonies po švitinimo elektronais pavyko suformuoti šiuos centrus, nustatytos IR linijos 922 ir 1037/cm. Pakartotini švitinimai skatina kurtis  $I_2O_{2i}$ , turinčius linijas 918 ir 1034/cm. Taip pat abiem centrums priskirta linija 545/cm. Nustatyta, kad  $IO_{2i}$  yra elektriškai aktyvus ir kuria akceptorinį lygmenį  $E_c - 0.11$  eV. Kambario temperatūroje šie defektai stabilūs, o atsikaitina  $IO_{2i}$  ties 400K ir  $I_2O_{2i}$  ties 550K [26].

Jei nė vienas iš žinomų radiacinių defektų neatitinka atsirandančių akceptorių, tai labiausiai tikėtina, jog tie centrai kuriami III grupės priemaišų, iš kurių tinkamiausia – boras. Borą, kaip priemaišą, (net ypatingai švarus) Si turi visada. Pastaroji priemaiša draustinėje juostoje kuria seklių lygmenį, tačiau dalis boro yra elektriškai neaktyvi. Apšvitinant, boras, esantis gardelės mazge ( $B_S$ ), sąveikauja su tarpmazginiu Si atomu ( $I$ ), susikuria tarpmazginis boro atomas ( $B_I$ ):



Kartu esant judrioms vakansijoms ( $V$ ), galima ir kita reakcija:  $B_I$  atstatymo į mazginę padėtį  $B_S$ . Kadangi tiesioginė defektų  $V$  ir  $I$  anihilacija apsunkinta, ji galima ties centrais, vykstant šioms reakcijoms, arba susikaupus defektams (koaguliacija). Kitur stebėti ir daugiavakansiniai klasteriai ( $V_6$ ,  $V_{10}$ ). Švitinant,  $V$  ir  $I$  atsiranda vienodas kiekis, o  $V$  koaguliuojant,  $I$  pasidaro perteklius, tuomet dalis jų sudaro paramagnetinius centrus. Tokiu būdu,

po apšvitinimo, kristalo tūryje boras, būdamas elektriškai neutralus, sąveikauja su vakansiniais defektais ir po atkaitinimo gali pereiti į elektriškai aktyvią būseną. Tai įmanoma esant didelėms elektronų švitinimo dozėms ir „švariam“ Si (jame anihiliacija nėra dominuojantis procesas), arba naudojant švitinimą su greitu  $V$  ir  $I$  kūrimu, pvz. naudojant neutronus ar jonus.

Dėl  $V_2$  skilimo (o deguonies turinčiame Si ir dėl  $A$  centrų) atsiranda daugiau  $V$  ir vyksta (4.2.) reakcija bei stebimas skylių tankio padidėjimas iki maksimumo ar įsisotinimas. Skylių tankio mažėjimas liudija, jog dominuoja (4.1.) reakcija. Defektai  $I$  taip pat sąveikauja su stambiais (stabiliais) vakansiniais kompleksais vykstant reakcijai(4.3.):



Tačiau  $V_{n-1}$  stabilumas mažesnis nei  $V_n$ , todėl gali vykti reakcija (4.4.) ir gaunama kristalo būseną, kuomet egzistuoja judrūs ir  $I$ , ir  $V$ . Dėl to galima ir atvirkščia reakcija (4.5.), pasibaigianti stabilia konfiguracija. Kol dominuoja (4.2.) reakcija, stebimas skylių tankio padidėjimas. Kuomet  $V$  prieauglis (dėl (4.4.) reakcijos) nusilpsta, bet generacija  $I$  tęsiasi, pradeda dominuoti (4.1.) reakcija ir stebimas staigus skylių tankio sumažėjimas.

## 4.1. lentelė. Silicio defektai[3]

Defektas	Krūvis	Lygmuo, eV	FTIR linijos, cm <sup>-1</sup>
Divakansija, V <sub>2</sub> (E-centras)	V <sub>2</sub> <sup>2-</sup> (D)	EC-0,23 (0,18)	2767
	V <sub>2</sub> <sup>1-</sup> (D)	EC-0,4 (0,42)	
	V <sub>2</sub> <sup>0</sup> (D)	EC-0,39	
	V <sub>2</sub> <sup>+</sup> (A)	EV+0,21 (0,21)	
Vakansija-deguonis A-centras	(VO) <sup>-</sup> (D)	EC-0,18; (0,165)	836 , 830
	(VO) <sup>o</sup>		
Vakansija-fosforas E-centras	(VP) <sup>-</sup> (D)	EC-0,44 (0,47)	
	(VP) <sup>0</sup>		
Vakansija-Aliuminis	(VAI) <sup>0</sup>		
	(VAI) <sup>+</sup> (A)	EV+0,48	
Vakansija-Boras	(VB) <sup>o</sup>		
	(VB) <sup>+</sup> (A)	EV+0,45	
Vakansija-deguonis-anglis (K-centras)	(VOC) <sup>0</sup>	EV+0,16	
	(VOC) <sup>+</sup> (A)	EV+0,3	
Tarpmazginis aliuminis	Al <sub>i</sub> <sup>0</sup>		
	Al <sub>i</sub> <sup>+</sup> (A)		
	Al <sub>i</sub> <sup>2+</sup> (A)	EV+0,25	
Tarpmazginė anglis	C <sub>i</sub> <sup>0</sup>	EC-0,12	
	C <sub>i</sub> <sup>+</sup> (A)	EV+0,27	
Tarpmazginė-mazginė anglis (G centras)		EC-0,17	
	(C <sub>i</sub> C <sub>s</sub> ) <sup>+</sup> (A)	EV+0,33 (0,062; 0,099) (0,97)	
	C <sub>i</sub> P <sub>s</sub>	EC-0,23; 0,30	
Tarpmazginis-mazginis	Al <sub>i</sub> Al <sub>s</sub> <sup>?</sup>	EV+0,23	
Tarpmazginis-mazginis boras	B <sub>i</sub> B <sub>s</sub> <sup>?</sup>	? EC-0,26	
Divakansija-deguonis	V <sub>2</sub> O <sup>o</sup>	? EC-0,3	833
	V <sub>2</sub> O		837, 840
Trivakansija-deguonis	V <sub>3</sub> O <sup>o</sup>	? EC-0,27	843
	V <sub>3</sub> O		848
RDL (strypai)		EV+0,5; 0,9	
C3 (C centras)	C <sub>3</sub> O <sub>i</sub>	EV+0,36; 0,8	865,742,1116, 860
C4	IC <sub>4</sub> O <sub>i</sub>		940, 1024, 724, 952, 973, 934,1018
	IC <sub>i</sub>		960, 966, 953
	DC <sub>i</sub> O <sub>i</sub>		991
	I <sub>2</sub> C <sub>i</sub> O <sub>i</sub>		998
Degunies dimeras	O <sub>i</sub> O <sub>i</sub>		1012
O <sub>2</sub> -vakansija	VO <sub>2</sub>		889, 928*, 1004*, 967,1023, 919
	V <sub>2</sub> O <sub>2</sub>		825
	2IO <sub>i</sub>		936
			1011
T centras	HC <sub>i</sub> C <sub>s</sub>	0,94	
H centras	CO	0,93	
M centras	I+C+H	0,76	
W centras	?	1,1; 1,02	
X centras	I4	1,04	
J centras	HV <sub>6</sub>	1,1	
Degunies	SiOSi	0,8	450,1090, 460, 1040-1160
	SiOC		488
Dislokacijų		0,87	
Karbido	SiC		730, 794, 820, 810-830, 687, 847
	IC <sub>3</sub> C <sub>s</sub>		987, 993
	2IC <sub>3</sub> C <sub>s</sub>		945, 964
Vandenilio	SiH <sub>2</sub>		627, 835, 870, 718, 750, 1950,1960
	SiH		2088-2111
	OSiH		2250
Vakansijos	V <sub>10</sub>	0,8; 0,7	

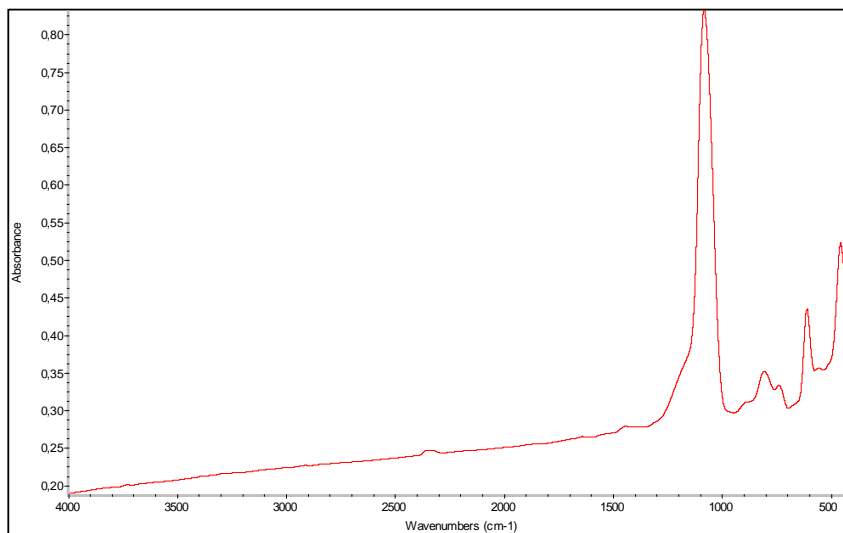
## **5. Eksperimento rezultatai**

Eksperimento metu silicio plokštelės buvo švitinamos Rentgeno spinduliais. Naudotas „PHYWE“ firmos rentgeno spindulių difraktometras su keičiamais vario, molibdeno ir geležies anodais (eksperimente naudoti tik vario ir molibdeno), maksimali anodinė įtampa 35kV (keičiama kas 0,1kV), srovė 1mA (keičiama kas 0,01mA). Prieš švitinimus ir po jų plokštelės buvo tiriamos „Thermo Nicolet IR 100 FT-IR“ spektroskopu, palyginami absorbcijos spektrai.

Tyrimai atlikti panaudojant vario (Cu) ir molibdeno (Mo) anodą. Vario anodo  $K_{\alpha}$  linijos bangos ilgis  $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ , o kvantų energija 8,06 keV t.y. didesnė nei silicio K sluoksnio jonizacijos energija.  $K_{\beta}$  linijos bangos ilgis  $\lambda = 1,404 \text{ \AA}$ , o kvantų energija 8,84 keV. Molibdeno anodo  $K_{\alpha}$  linijos bangos ilgis  $\lambda = 0,704 \text{ \AA}$ , o kvantų energija 17,63 keV,  $K_{\beta}$  linijos bangos ilgis  $\lambda = 0,644 \text{ \AA}$ , o kvantų energija 19,27 keV. Maksimali fotonų energija 35 keV (pagal 1.1 formulę). Maksimali Anodinė įtampa  $U = 35 \text{ kV}$ , t.y. maksimali leistina „PHYWE“ difraktometro įtampa. Anodinė srovė  $J = 1 \text{ mA}$  taip pat parinkta maksimali leistina (siekiant išgauti maksimalų fotonų skaičių  $N \approx 10^9 \text{ kvantų/cm}^2\text{s}$ ). Naudoti p-tipo Cz-Si bandiniai, kurių storis 0,6 mm.

Atskirai atliktas eksperimentas, kai tas pats bandinys švitinamas kelis kartus. Su vario anodu Si plokštelės švitinamos 2 kartus. Pirmas švitinimas truko 4 valandas, antras – 5 valandas praėjus parai po pirmo švitinimo. Kaip minėta ankščiau, prieš švitinimus ir po jų bandiniai buvo tiriami FT-IR spektroskopu ir palyginami jų absorbcijos spektrai. Absorbcijos spektrai pateikti 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5 pav., o intensyvumų pikai 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5 lentelėse.

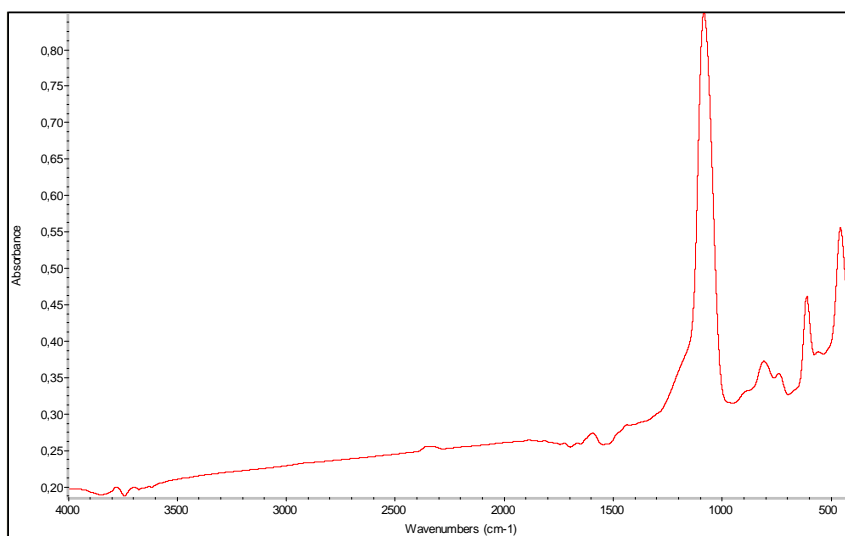
Naudojant molibdeno anodą, Si plokštelė buvo švitinama 5 valandas. Prieš ir po švitinimo absorbcijos spektrai pateikti 5.6, 5.7 pav., o intensyvumo pikai 5.6. 5.7 lentelėse.



5.1. pav. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektras prieš švitinimą Rentgeno spinduliais

5.1. lentelė. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektro smailių pikai prieš švitinimą Rentgeno spinduliais.

Banginis kaičius, $\text{cm}^{-1}$	Intensyvumas, %
456,08	0,524
556,88	0,355
610,80	0,437
739,68	0,332
807,87	0,350
1083,27	0,834
1388,78	0,277
1442,45	0,277
1641,99	0,264
1826,53	0,254
2352,01	0,245
2913,04	0,225
3073,59	0,220
3109,90	0,219
3291,62	0,214
3460,95	0,207
3732,70	0,199

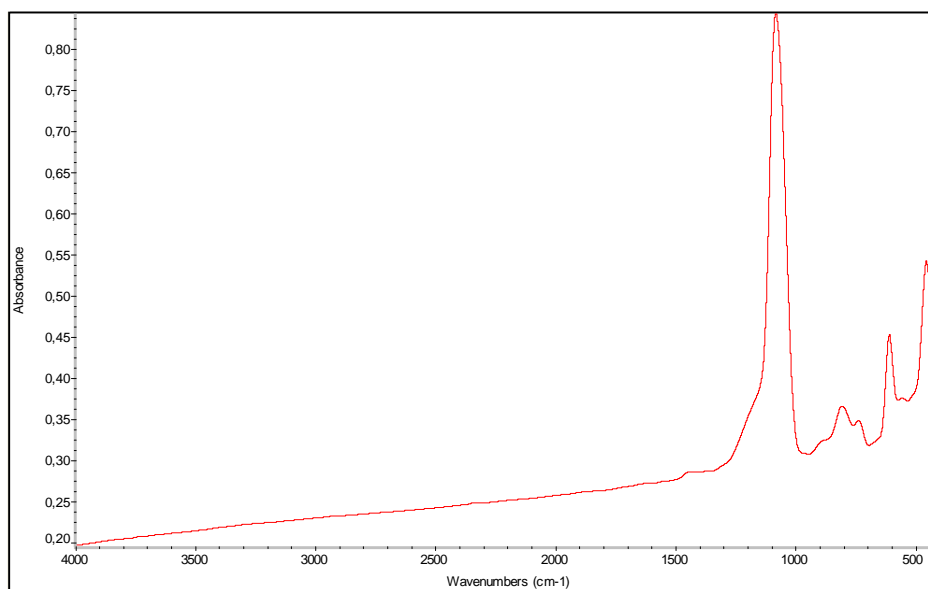


5.2. pav. . Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektras po pirmo 4 valandų švitinimo Rentgeno spinduliais. Anodinė įtampa 35 kV, Cu anodas.

5.2. lentelė. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektro smailių pikai po 4 valandų švitinimo Rentgeno spinduliais.

Banginis kaičius, $\text{cm}^{-1}$	Intensyvumas, %
455,82	0,557
557,69	0,384
610,61	0,463
739,12	0,354
807,99	0,371
1083,28	0,851
1435,71	0,283
1594,35	0,272
1664,78	0,258
1724,13	0,258
1814,18	0,262
1860,32	0,262
1886,50	0,262
1956,54	0,260
2326,29	0,253
2354,60	0,253
3632,66	0,199
3654,77	0,197
3697,70	0,197
3780,55	0,197
3967,02	0,195

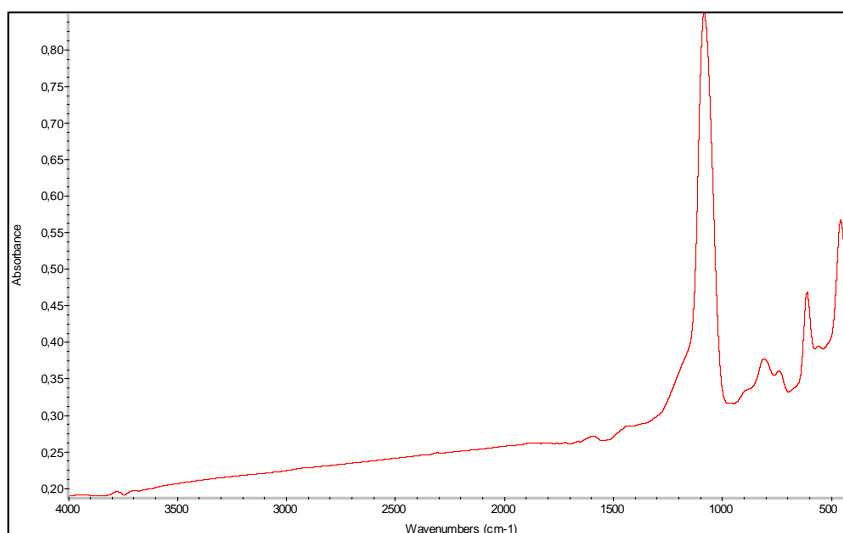




5.3. pav. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektras praėjus 24 valandoms po pirmo švitinimo.

5.3. lentelė. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektro smailių pikai praėjus 24 valandoms po pirmo švitinimo.

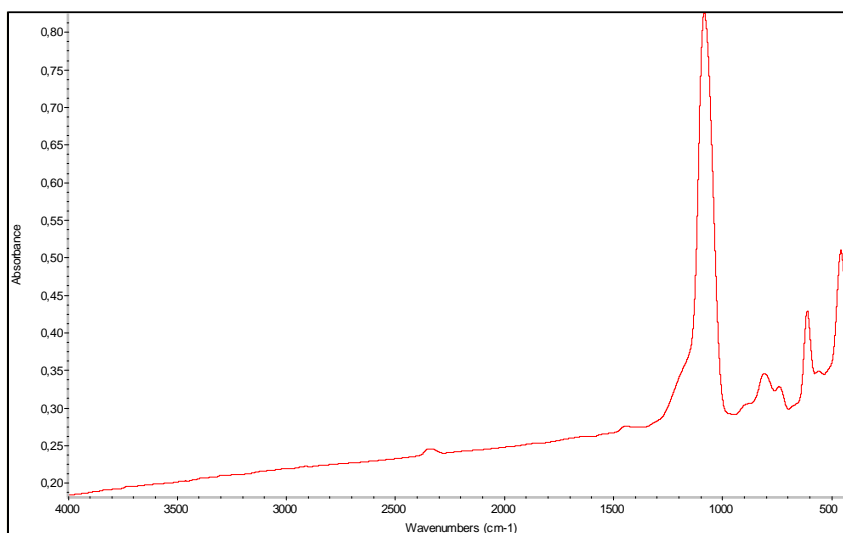
Banginis kaičius, $\text{cm}^{-1}$	Intensyvumas, %
456,08	0,543
558,61	0,374
610,65	0,454
739,28	0,347
807,99	0,364
1083,29	0,845
1364,18	0,285
1440,55	0,285
1612,20	0,270
1639,29	0,270
2311,01	0,247
2913,45	0,231
3730,06	0,206



5.4. pav. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektras po antro 5 valandų švitinimo Rentgeno spinduliais. Anodinė įtampa 35 kV, Cu anodas.

5.4. lentelė. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektro smailių pikai po antro 5 valandų švitinimo Rentgeno spinduliais.

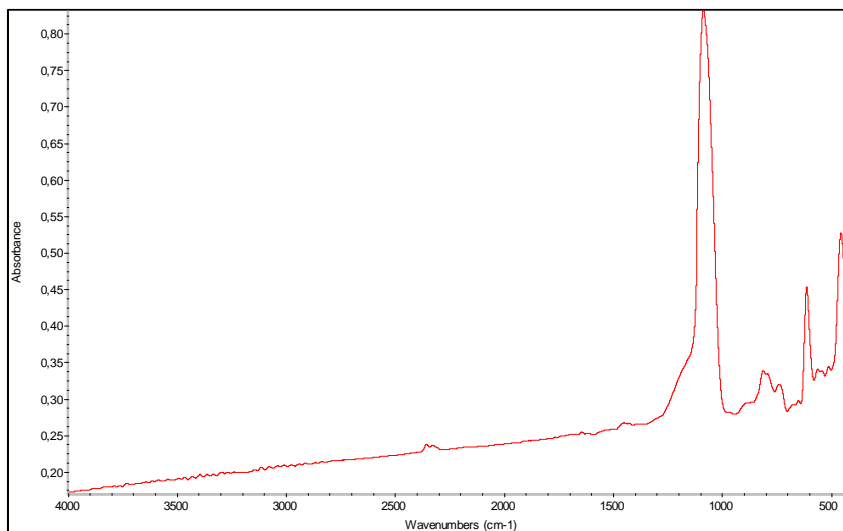
Banginis kaičius, $\text{cm}^{-1}$	Intensyvumas, %
455,84	0,568
558,43	0,392
610,49	0,469
738,89	0,359
808,09	0,376
1083,34	0,851
1436,31	0,283
1593,67	0,270
1663,15	0,262
1722,82	0,261
1759,14	0,260
1785,03	0,260
1812,98	0,260
1857,81	0,260
1879,08	0,260
2306,58	0,247
2376,68	0,243
3630,78	0,198
3696,67	0,195
3779,95	0,194



5.5. pav. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektras praėjus 2 paroms po antro švitinimo.

5.5. lentelė. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektro smailių pikai praėjus 2 paroms po antro švitinimo.

Banginis kairčius, $\text{cm}^{-1}$	Intensyvumas, %
456,26	0,511
558,76	0,347
610,85	0,430
739,66	0,327
807,88	0,345
1083,27	0,827
1386,54	0,273
1443,67	0,274
1620,85	0,260
1641,76	0,260
2338,73	0,243
2350,03	0,243
2912,62	0,220
3007,23	0,217
3075,10	0,215
3112,82	0,214
3230,19	0,209
3294,46	0,208
3392,53	0,204
3464,81	0,201
3537,41	0,198
3583,65	0,197
3729,46	0,193



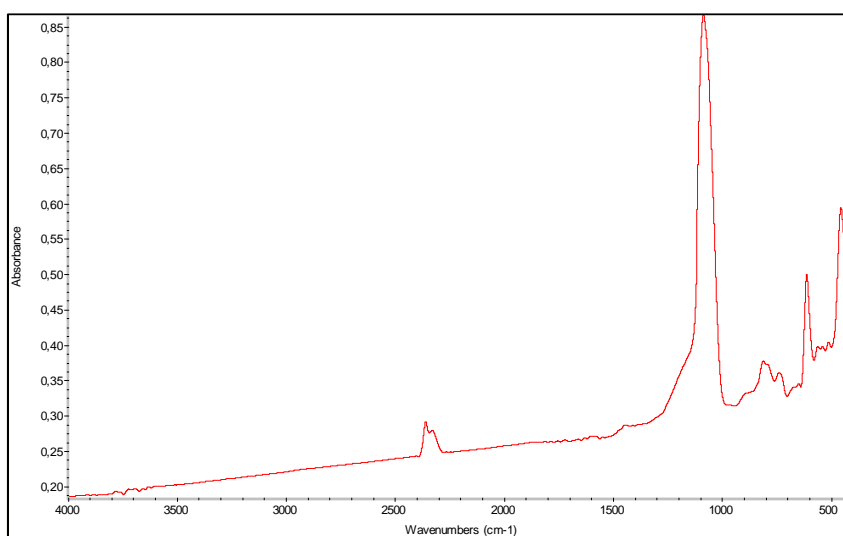
5.6. pav. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektras prieš švitinimą Rentgeno spinduliais (Mo anodas).

5.6. lentelė. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektro smailių pikai prieš švitinimą (Mo anodas).

Banginis kaičius, $\text{cm}^{-1}$	Intensyvumas, %
404,98	0,424
457,84	0,527
514,53	0,342
544,30	0,337
563,81	0,339
613,45	0,451
650,43	0,296
673,55	0,291
738,94	0,319
796,10	0,333
815,01	0,337
868,07	0,293
891,61	0,293
967,22	0,280
1085,95	0,832
1365,51	0,264
1392,72	0,264
1426,65	0,265
1450,38	0,266
1506,00	0,257
1537,37	0,255
1593,62	0,250
1618,30	0,252

Banginis kaičius, $\text{cm}^{-1}$	Intensyvumas, %
1645,43	0,253
1672,71	0,250
1696,25	0,250
1737,85	0,248
1766,32	0,246
1792,63	0,244
1823,76	0,243
1865,40	0,242
1888,45	0,241
1912,97	0,240
1939,56	0,239
1963,89	0,238
1989,34	0,237
2013,84	0,236
2329,60	0,235
2359,27	0,236
2399,58	0,225
2591,63	0,218
2616,97	0,218
2671,85	0,216
2717,34	0,215
2740,75	0,214
2786,74	0,213
2838,07	0,212
2865,99	0,211
2914,43	0,211
2944,00	0,209
2979,94	0,207
3012,30	0,208
3041,74	0,207
3079,97	0,206
3115,18	0,205
3144,82	0,201
3188,05	0,198
3216,07	0,197
3238,66	0,198
3268,62	0,198
3300,72	0,198
3337,96	0,195
3366,13	0,195
3397,66	0,195
3432,70	0,192
3466,85	0,191
3494,27	0,189
3542,75	0,188
3587,78	0,187

Banginis kaičius, $\text{cm}^{-1}$	Intensyvumas, %
3613,63	0,186
3644,26	0,184
3688,76	0,183
3735,51	0,183
3765,49	0,179
3790,46	0,179
3815,69	0,178
3837,64	0,178
3865,02	0,176
3887,62	0,175
3916,09	0,173



5.7. pav. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektras po švitinimo (Mo anodas).

5.7. lentelė. Si plokštelės IR spindulių absorbcijos spektro smailių pikai po švitinimo (Mo anodas).

Banginis kaičius, $\text{cm}^{-1}$	Intensyvumas, %
407,98	0,503
457,96	0,594
514,10	0,403
541,78	0,396
562,48	0,397
613,24	0,498
650,42	0,344
672,02	0,339
737,76	0,359
800,15	0,372

Banginis kaičius, $\text{cm}^{-1}$	Intensyvumas, %
814,77	0,376
889,06	0,331
966,21	0,313
1086,00	0,867
1409,95	0,284
1442,21	0,285
1550,19	0,268
1586,38	0,270
1599,94	0,270
1631,88	0,267
1663,28	0,265
1722,35	0,264
1755,73	0,263
1784,97	0,262
1811,98	0,262
1856,96	0,261
1882,61	0,261
1931,39	0,258
1956,77	0,257
1981,10	0,256
2148,89	0,250
2247,77	0,247
2267,95	0,247
2332,12	0,278
2362,54	0,291
2404,17	0,242
2426,39	0,240
2448,69	0,240
2471,84	0,239
2496,87	0,238
3246,70	0,210
3319,59	0,207
3512,05	0,200
3536,02	0,200
3587,64	0,199
3633,02	0,198
3662,36	0,195
3694,93	0,195
3725,15	0,194
3764,78	0,191
3785,20	0,191
3812,62	0,188

5.8. lentelė. Si plokštelės defektai ir jų kitimas švitininant Rentgeno spinduliais.

Padėtis	Defektas	Pastabos	I prieš švitinimą	I po pirmo švitinimo(Cu, 4 val)	I po paros	I po antro švitinimo(Cu, 5 val)	I po 2 parų	I po savaitės	I po švitinimo (Mo, 4 val.)
456	Si – O – Si (450-460 ) 517	Simetrinis ryšys	<b>0,524</b> 456,08	<b>0,557</b> 456,08→455,82	<b>0,543</b> 455,82→456,08	<b>0,568</b> 456,08→455,84	<b>0,511</b>	<b>0,527</b> 457,84	<b>0,594</b> 457,96
513	Si – O – Si 517	Simetrinis ryšys	<b>0,38</b> 513,22					<b>0,342</b> 514,53	<b>0,403</b> 514,10
526	C <sub>s</sub> C <sub>s</sub>		<b>0,367</b>						
544	C <sub>i</sub> C <sub>s</sub>							<b>0,337</b> 544,3	<b>0,396</b> 541,78
556 - 559	LO+TO (548 – 569)	Si izotopas	<b>0,355</b> 556,88	<b>0,384</b> 556,88→557,69	<b>0,374</b> 557,69→558,61	<b>0,392</b> 558,61→558,43	<b>0,347</b>		
565	LO+TA	Si 28	<b>0,374</b>					<b>0,339</b> 563,81	<b>0,397</b> 562,48
610	TO+TA (591 – 612)	Gali persikloti SiC (605 -607)	<b>0,437</b> 610,80	<b>0,463</b> 610,80→610,61	<b>0,454</b> 610,41→610,65	<b>0,469</b> 610,65→610,49	<b>0,430</b>	<b>0,451</b> 613,45	<b>0,498</b> 613,24
739	LO +LA (715 – 741)	Gali persikloti C <sub>i</sub> O <sub>i</sub> (742) Deguonis iš C centro	<b>0,332</b> 739,68	<b>0,354</b> 739,68→739,12	<b>0,347</b> 739,12→739,28	<b>0,359</b> 739,28→738,89	<b>0,327</b>	<b>0,319</b> 738,94	<b>0,359</b> 737,76
794	TO+LA ( 791 – 819)	Si 30 izotopas, Gali persikloti SiC fononas	<b>0,361</b>					<b>0,333</b> 796,10	
807	TO+LA ( 791 – 819)	Si 29 izotopas	<b>0,350</b> 807,87	<b>0,371</b> 807,87→807,99	<b>0,364</b> 807,99→807,99	<b>0,376</b> 807,99→808,09	<b>0,345</b>	<b>0,337</b> 815,01	<b>0,376</b> 814,77
872, 881	TO +LO	Gali persikloti VO <sup>-</sup>	<b>0,322</b>						
889	VO <sub>2</sub> <sup>-</sup>								<b>0,331</b>
965	IC <sub>i</sub> arba VO <sub>2</sub> (vakansija O <sub>2</sub> )	Gali būti anglis iš C <sub>i</sub> O <sub>i</sub> (C centro)	<b>0,307</b>					<b>0,280</b> 967,22	<b>0,313</b> 966,21
1083	Si – O – Si (1040 – 1160, 1090)	Asimetrinis ryšys. Gali persikloti su 2TO+TA (1118)	<b>0,834</b> 1083,27	<b>0,851</b> 1083,27→1083,28	<b>0,845</b> 1083,28→1083,29	<b>0,851</b> 1083,29→1083,34	<b>0,827</b>	<b>0,832</b> 1085,95	<b>0,867</b> 1086
1395	3TO (1398 – 1450)	Si 30 izotopas	<b>0,287</b>					<b>0,264</b> 1392,72	
1442	3TO (1398 – 1450)	Si 29 izotopas	<b>0,277</b> 1442,45	<b>0,283</b> 1442,45→1435,71	<b>0,285</b> 1435,71→1440,55	<b>0,283</b> 1440,55→1436,31	<b>0,274</b>		<b>0,285</b> 1442,21
1455	3TO	Si 28 izotopas	<b>0,285</b>					<b>0,266</b> 1450,38	
1956	Si H <sub>2</sub>	1950-1960	<b>0,257</b>						<b>0,257</b> 1956,77
2723	V <sub>2</sub> divakansija (E centras)	V <sub>2</sub> <sup>2-</sup> , V <sub>2</sub> <sup>-</sup> , V <sub>2</sub> <sup>0</sup> , V <sub>2</sub> <sup>+</sup> būsenos	<b>0,234</b>						



Ankstesni tyrimai (prof. A. Janavičiaus ir dr. Ž. Norgėlos) parodė, kad nuo švitinamo paviršiaus į bandinio gyli juda neigiamas elektros krūvis. Labai tikėtina, kad krūvį perneša paviršiuje sukurtos  $V^-$ ,  $V^{2-}$  ar  $V_2O^-$  kompleksai. [27, 28].

FT-IR absorbciniame spektre matome smailę ties 1083 /cm. Ji būdinga Si-O-Si vibracijai (1090 /cm pagal [19], 1040-1060/cm pagal [22]). Šios smailės intensyvumas padidėja po 4 valandų švitinimo (nuo 0,834 iki 0,851), o praėjus parai artėja prie pradinės vertės, tačiau pilnai neatsistato ( $I = 0,845$ ). Tą patį bandinį pašvitinius pakartotinai vėl stebimas intensyvumo padidėjimas (nuo 0,845 iki 0,851). Praėjus dviem paroms intensyvumas atsistato ( $I = 0,834$ ). Toks intensyvumo kitimas rodo, kad Si-O-Si ryšių kiekis Rentgeno spinduliais veikiamame bandinyje padidėja. Tai galėtų būti susiję su tuo, kad veikiant spinduliuotei į bandinį skverbiasi deguonis. Yra žinoma, kad vakansijos yra linkusios reaguoti su deguonimi, jungiantis į A centrus, kurie yra paskesnių V ir O kaupimosi centrai.

Naudojant molibdeno anodą švitinto pavyzdžio absorbcinio spektro smailių intensyvumai didesni. Pavyzdžiui, tos pačios Si-O-Si vibraciją atitinkančios smailės (1086 /cm) intensyvumas po švitinimo padidėjo iki 0,867 (naudojant vario anodą po antro švitinimo intensyvumas buvo 0,851). Tai galima paaiškinti tuo, kad molibdeno anodo kvantų energija didesnė, todėl defektai kuriami didesniame tūryje.

Galima išskirti dar kelis literatūroje minimus virpesius: 739 ( $C_1O_1$ ), 807 (TO+LA). Naudojant Mo anodą, atsiranda linija ties 889  $cm^{-1}$ , kuri priskiriama  $VO_2^-$ . Nors kitimas netolygus, galima stebėti, jog kai Si-O-Si intensyvumas po švitinimo padidėja 2%,  $C_1O_1$  išauga 6,6%. Taip pat keičiasi kai kurių foninių linijų intensyvumas. Tai leidžia daryti prielaidas, jog taškiniai defektai kaupiasi į klasterius, susijusius su deguonies kitimu.

Jei bandinyje yra daug deguonies, tai susikūrusios vakansijos reaguoja su juo, o tarpmazginiai Si iš mazgų ištraukia anglį, kuri kambario temperatūroje yra judri, bei jungiasi su deguonimi ar su kita mazgine anglimi į nepaslankius centrus. Kadangi deguonies daug, tai tikėtina, kad anglis jungiasi į kompleksą  $C_1O_1$ .

**Išvados:**

1. FT-IR metodas leidžia nustatyti įvairius defektus bei jų koncentracijas;
2. Paveikus Si monokristalą minkštąja Rentgeno spinduliuote keičiasi absorbcinių spektrų smailių maksimumų padėtys ir intensyvumai. Kai kurios smailės išnyksta, atsiranda naujos;
3. Apibendrinan įvairių eksperimentų rezultatus (iš analizuotos literatūros) galima teigti, kad antroje išvadoje paminėti pokyčiai susiję su taškinių defektų tarpusavio reakcijomis.

### Literatūros sąrašas:

1. V. Karenauskaitė, S. Bagdonas ir kt. Biomedicinos fizika kolegijų studentams. Vilnius 2002.;
2. Fizika tvirdovo tela. A.A. Kacnelson, G.C. Krinčik. Moskovskij universitet. 1982 m. 303 psl.;
3. Algirdas Mekys. Daktaro disertacija. Medžiagų, taikomų jonizuojančiosios spinduliuotės detektorių gamyboje, defektai ir jų reakcijos. Vilniaus universitetas, 2008 m.;
4. [http://fcim.vdu.lt/Conferences/F00017C98/FOV1-0001B6D2/FAV10001B6CE/1\\_skyrius.doc?FCItemID=S01F45823](http://fcim.vdu.lt/Conferences/F00017C98/FOV1-0001B6D2/FAV10001B6CE/1_skyrius.doc?FCItemID=S01F45823) 2009-04-20;
5. V.S. Vavilov., N.P. Kekelidze, L.S. Smirnov. Deistija izlucenij na poluprovodniki. Moskva, "Nauka", 1988 m. 191 psl.;
6. V.S. Vavilov. Migracija atomov v poluprovodnikach i izmenenija čisla i struktury defektov, iniciruemyje vozbuždenijem elektronnoj podsystemy. Uspechi fizičskich nauk. April, 1997, tom 167, No 4, 407-410 s.;
7. George D. Watkins. Intrinsic defects in silicon. *Materials Science in Semiconductor Processing* 3 (2000) 227-235;
8. J. Tauc. Foto- i termoelektriceskyje jevlenija b poluprovodnikach. Moskva. 1962. 255 psl.;
9. V.S. Vavilov. Deistvija izlucenij na poluprovodniki. Moskva. Fizmatgiz. 1963. 264 psl.;
10. V.F. Stas, I. V. Antonova. Termoakceptory b ablucennoj kremniji. Fizika i mehanika poluprovodnikov. 2000, tom 34, vyp. 2, 162-167 psl.;
11. Thomas Witting. Defect and impurity distributions in traditionally cast multicrystalline and cast monocrystalline silicon for solar substrates. Raleigh, North Carolina, 2008 m.;
12. C.-P. Sherman Hsu, Ph.D. Infrared Spectroscopy. Chapter 15. Handbook of Instrumental Techniques for Analytical Chemistry;
13. FT-IR Measurement of Interstitial Oxygen and Substitutional Carbon in Silicon Wafers. Ross Boyle, Thermo Fisher Scientific, Madison, WI, USA;
14. P.G. Sennikov, T. V. Kotereva, A. G. Kurganov, B. A. Andreev, H. Niemann, D. Schiel, V. V. Emstev, H. –J. Pohl. Spectroscopic parameters of LVM absorption bands of carbon and oxygen impurities in isotopic enriched silicon Si<sup>28</sup>, Si<sup>29</sup>, and Si<sup>30</sup>. 2005, Vol. 39, Issue 3, pp. 320-326.;

15. L. I. Murin, J. L. Lindström, G. Davies, V. P. Markevich. Evolution of radiation-induced carbon-oxygen related defects in silicon upon annealing: LVM studies. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 253 (2006) 210-213.;
16. Gordon Davies, Shusaku Hayama, Leonid Murin, Reinhard Krause-Rehberg, Vladimir Bondarenko, Asmita Sengupta, Cinzia Davia, Anna Karpenko. Radiation damage in silicon exposed to high-energy protons. *Phys. Rev. B* 73 1-10 (2006);
17. R. R. Wixom, A. F. Wright. Formation energies, binding energies, structure and electronic transitions of Si divacancies studied by density functional calculations. *Phys. Rev. B* 74, 205208(2006) 1-6;
18. M. Huhtinen. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 491 (2002) 194–215;
19. M. S. Potsidi, C. A. Londos. The  $C_iCs(Si)$  defect in silicon: An infrared spectroscopy study. *J.App. Phys.* 100, 033523 (2006) 1-4;
20. Xueqin Liu, Jing Zhang, Zhijun Yah, Shuyi Ma, Yinyue Wang. Photoluminescence from SiC nanocrystals embedded in SiO<sub>2</sub>. *Mater. Phys. Mech.* 4 (2001) 85-88;
21. C.A. Londos, M.S. Potsidi, E.Stakakis. Carbon-related complexes in neutron-irradiated silicon. *Physica B* 340–342 (2003) 551–555;
22. C.A. Londos, M.S. Potsidi, G.D. Antonaras, A. Andrianakis. Isochronal annealing studies of carbon-related defects in irradiated Si. *Physica B* 376–377 (2006) 165–168;
23. Shuai Yang, Yangxian Li, Qiaoyun Ma, Lili Liu, Xuwen Xu, Pingjuan Niu, Yongzhang Li, Shengli Niu, Hongtao Li. Infrared absorption spectrum studies of the VO defect in fast-neutron-irradiated Czochralski silicon. *Journal of Crystal Growth* 280 (2005) 60–65;
24. J. L. Lindström, L. I. Murin, B. G. Svensson, V. P. Markevich, T. Hallberg. The VO<sub>2</sub>\* defect in silicon. *Physica B* 340-342 (2003) 509–513;
25. Veronique Boisvert, Michael Moll, Lennart Lindstrom, Leonid Murin, Iona Pintilie, Eckhart Fretwurst, Joerg Stahl. Oxygen dimer enriched silicon. 5th RD50 Workshop on Radiation hard semiconductor devices for very high luminosity colliders CERN, 5-7 May, 2004;
26. P.G. Litovchenko, A.A. Groza, V.I. Varnina, M.I. Starchik, V.I. Khivrich, G.G. Shmatko, L.A. Polivzev, M.B. Pinkovska, D. Bisello, A. Candelori, A.P. Litovchenko, J. Wyss, W. Wahl. Radiation defects in neutron irradiated silicon with high oxygen concentration. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 514 (2003) 44–46;

27. J. L. Lindström, T. Hallberg, J. Hermansson, L. I. Murin, B. A. Komarov, V. P. Markevich, M. Kleverman, B.G. Svensson. Interaction between self-interstitials and the oxygen dimer in silicon. *Physica B* 308–310 (2001) 284–289;
28. George D. Watkins. Intrinsic defects in silicon. *Materials Science in Semiconductor Processing* 3 (2000) 227-235;
29. Michael Moll. Development of Radiation Hard Sensors for Very High Luminosity Colliders. 11th International Workshop on Vertex Detectors, VERTEX 2002, Hawaii, 2002.