

ŠIAULIŲ UNIVERSITETO
GAMTOS MOKSLŲ FAKULTETO
FIZIKOS KATEDRA

Viktorija Gražulytė

Fizikos magistrantūros studijų programos II kurso studentė

**VAKANSIJŲ GENERAVIMO KIETAME KŪNE, VEIKIANT
MINKŠTAIS RENTGENO SPINDULIAIS, TYRIMŲ ANALIZĖ**

**VACANCIES GENERATION IN A SOLID BODY BY IRRADIATION OF SOFT
X-RAYS, RESEARCH ANALYSIS**

MAGISTRO DARBAS

Darbo vadovas:
Prof. habil. dr. A. J. Janavičius

Šiauliai, 2013

„Tvirtinu, jog darbe pateikta medžiaga nėra plagijuota ir paruošta naudojant literatūros sąrašę pateiktus informacinius šaltinius bei savo tyrimų duomenis“

Darbo autorė _____

(vardas, pavardė, parašas)

Anotacija

Darbą „VAKANSIJŲ GENERAVIMO KIETAME KŪNE, VEIKIANT RENTGENO SPINDULIAIS, TYRIMŲ ANALIZĖ“ sudaro: įvadas, 7 skyriai, 16 literatūros šaltinių, išvados. Darbe pateikti 28 paveikslėliai ir 2 lentelės. Darbo apimtis 56 puslapiai.

Darbe pateikta nagrinėjamos temos mokslinės literatūros apžvalga ir jos analizė, aptartas vakansijų generavimas silicio monokristale, veikiant minkštais Rentgeno spinduliais. Aprašyti svarbiausi ir naujausi rezultatai susiję su difuzija silicio monokristale bei išanalizuotas Rentgeno spinduliuotės taikymas elektronikos prietaisų gamyboje.

Annotation

The work „VACANCIES GENERATION IN A SOLID BODY BY IRRADIATION OF SOFT X-RAYS, RESEARCH ANALYSIS“ consists of an introduction, 7 chapters, 16 literary sources, conclusion. The paper presents 28 figures and 2 tables. Work consists of 56 pages.

Review and analysis of literature on the indicated topic is performed in the work, generation of vacancies in silicon monocrystalline under the influence of soft X-rays is discussed. The most important and recent results related to the diffusion in silicon monocrystalline are described as well as X-ray radiation appliance in electronics production.

Turinys

| | |
|---|-----------|
| Išvadas | 5 |
| 1. Kietasis kūnas..... | 7 |
| 1.1. Atomų sąveika kietuosiuose kūnuose | 8 |
| 2. Kristalai | 10 |
| 2.1. Kristalinės gardelės | 12 |
| 2.2. Svarbiausios specifinės kristalų savybės..... | 14 |
| 2.3. Kristalų klasifikacija pagal cheminio ryšio tipą..... | 16 |
| 2.4. Kristalų defektai | 18 |
| 2.4.1 Taškiniai kristalų defektai | 18 |
| 2.4.2. Šiluminiai taškiniai defektai | 20 |
| 2.4.3. Radiaciniai kristalų defektai | 22 |
| 2.4.4. Priemaišiniai defektai | 23 |
| 3. Rentgeno (x – ray) spinduliuotė. Jos gavimas ir registracija..... | 24 |
| 4. Vakansijų generavimas minkštaisiais Rentgeno spinduliais | 28 |
| 4.1. Rentgeno spinduliais sužadintų vakansijų difuzijos koeficientas silicio monokristale | 32 |
| 4.2. Silicio kristalų elektrinis laidumas ir vakansijų difuzijos koeficientas | 37 |
| 4.3. Relaksacijos procesai, inicijuojami minkštaisiais Rentgeno spinduliais, kristaliniame silicyje | 41 |
| 5. Gautų rezultatų analizė | 44 |
| 6. Silicio plokštelių gamyba..... | 48 |
| 7. Rentgeno spinduliuotės taikymas elektronikos prietaisų gamyboje | 51 |
| Išvados..... | 55 |
| Literatūros sąrašas | 56 |

Ivadas

Šiuolaikinės kietųjų kūnų fizikos (KKF) pamatai buvo pradėti XX a. pradžioje. Pagrindinės dvi kietųjų kūnų fizikos šakos yra metalų fizika ir puslaidininkių fizika. Iki Antrojo pasaulinio karo KKF buvo visų pirma metalų fizika, tačiau po karo į priekį išsiveržė puslaidininkių fizikinių savybių tyrimai ir tebedominuoja iki šiol, visų pirma, dėl išskirtinio vaidmens, tenkančio puslaidininkiams šiuolaikinėje mikro- ir optoelektronikoje [1].

1897 m. anglų fizikas Dž. Tomsonas (*J. Thomson*) atrado elektroną. Nuo tada pradėjo formuotis nauja mokslo ir technikos sritis – elektronika. Per šimtmetį ji taip veržliai vystėsi ir tobulėjo, kad įsiskverbė praktiškai į visas žmogaus veiklos sritis. Pastaruoju metu elektronika tapo besikuriančios informacinės visuomenės varikliu.

Spręsdami informacijos apdorojimo ir perdavimo uždavinius šiuolaikinės elektronikos srities mokslininkai ir inžinieriai taiko naujausius visų mokslo sričių laimėjimus. Apdorojant informaciją jau naudojami ne tik elektronai, bet ir kitos dalelės – fotonai, ne tik elektronų krūviai, bet ir jų magnetinės savybės. Mikroelektronika transformuojasi į nanoelektroniką. Prognozuojama, kad, taikant nanotechnologijas, informacija bus apdorojama molekuliniam lygyje. Nanotechnologijos taikys kvantinius reiškinius ir reiškinius biologinėse sistemose.

Svarbiausieji šiuolaikinės elektroninės aparatūros komponentai yra silicio integriniai grandynai. Jų elementai (tranzistoriai, rezistoriai, kondensatoriai) ir juos jungiantys laidieji takeliai suformuojami vienu technologinių procesų ciklu ir sudaro nedalomą visumą.

Silicio integrinių grandynų gamybos technologinius procesus galima suskirstyti į tris grupes. Pirmajai paruošiamųjų procesų grupei priskiriami silicio plokštelių bei grandynų korpusų detalių ir mazgų gamybos procesai. Antrąją grupę sudaro puslaidininkinių elementų formavimo silicio plokštelėse procesai. Elementai formuojami planariaja technologija, taikant epitaksijos, šiluminės priemaišų difuzijos, jonų implantavimo, dielektrinių ir metalinių sluoksnių sudarymo, fotolitografijos bei kitus procesus. Pagaliau trečiajai gamybos technologinių procesų grupei priskiriami integrinių grandynų surinkimo, kontrolės ir bandymo procesai [2].

Difuzijos procesas silicio puslaidininkių integrinių grandinių technologijoje taikomas aktyviųjų (tranzistorių, diodų) ir pasyviųjų (rezistorių, kondensatorių, jungiamųjų takelių) elementų struktūroms formuoti. Siekiant gauti reikalingą savitą puslaidininkio varžą arba

pakeisti laidumo tipą, į silicio kristalą įterpiami kito elemento atomai, kitaip tariant, silicio kristalas yra prisotinamas defektais.

Šiuo metu intensyviai tiriama elektromagnetinės ir korpuskulinės spinduliuotės įtaka puslaidininkių bei puslaidininkinių prietaisų savybėms. Pirmieji eksperimentai, kuriuose gauta informacija apie radiacinius defektus silicyje (Si), buvo atlikti jau 1955 – 1960 m. Radiaciniais defektais vadinami lokalūs kristalo struktūros pakitimai veikiant elektromagnetinei arba korpuskulinei spinduliuotei. Įvairių rūšių spinduliuotei veikiant kristalą, jame gali atsirasti pavieniai taškiniai defektai: vakansijos, tarpmazginiai atomai, priemaišiniai atomai, gardelės mazguose ir tarpmazgiuose, defektų kompleksai ir t. t. Šie defektai gali stipriai įtakoti kristalo fizines savybes.

Greitos vakansijos, judančios p – Si kristale, buvo stebėtos apšvitinus kristalą tolydaus spektro minkštąja Rentgeno spinduliuote. Minkštąja rentgeno spinduliuote generuotų vakansijų sąlygotas laidumo Si monokristale kitimas ir ilgalaikė laidumo relaksacija nutraukus švitinimą buvo stebima eksperimente.

Tyrimo aktualumas ir tyrimo problema. Silicis šiuo metu yra dažniausiai naudojama medžiaga gaminant mikroschemas ir elektroninius prietaisus. Susiduriama su problema, kaip įvesti į silicio kristalą priemaišas, sukuriant kuo mažiau defektų kristale.

Tyrimo objektas. Vakansijos silicio monokristale, paveiktame minkštąja Rentgeno spinduliuote.

Tyrimo tikslas. Vakansijų, generuotų minkštąja Rentgeno spinduliuote Si monokristalo pavyzdėlyje, difuzijos modeliavimas remiantis bandinio elektrinio laidumo kitimu.

Uždaviniai:

1. Apžvelgti mokslinę literatūrą ir ją išanalizuoti.
2. Aptarti vakansijų generavimą Si monokristale, veikiant Rentgeno spinduliais.
3. Išanalizuoti svarbiausius ir naujausius rezultatus susijusius su difuzija Si monokristale.
4. Išanalizuoti Rentgeno spinduliuotės taikymą elektronikos prietaisų gamyboje.
5. Apibendrinti ir padaryti išvadas.

1. Kietasis kūnas

Kūnai susideda iš atomų, jonų arba molekulių. Šias daleles toliau vadinsime kūno struktūrinėmis arba cheminėmis dalelėmis. Gamtoje kūnai būna keturių agregatinių būsenų: kietieji, skystieji, dujos ir plazma. Medžiagos kietąją ir skystąją būseną dar vadiname kondensuotąja būsena. Kondensuotoje būsenoje esančios kūno struktūrinės dalelės erdvėje pasiskirsčiusios tam tikra tvarka [3]. Kietieji kūnai pasižymi formos ir matmenų pastovumu. Pagal elektrinį laidumą normalioje temperatūroje jie skirstomi į laidininkus, puslaidininkius ir izoliatorius. Kietųjų kūnų savybes lemia medžiagų sandaros ypatumai [2]. Pagal molekulių ir atomų išsidėstymą erdvėje kietieji kūnai dažniausiai klasifikuojami į kristalinius ir amorfinius. Tokį skirstymą sąlygoja lydymosi ir kristalizacijos ypatumai, įvairių fizinių savybių priklausomybė nuo krypties ir kt. Kristaliniai kūnai turi griežtai apibrėžtą lydymosi temperatūrą. Tai reiškia, kad ryšių tarp dalelių nutraukimas vyksta griežtai apibrėžtame šiluminiame režime, ir temperatūra nekinta tol, kol visas kietasis kūnas neišsilydys. Energija naudojama tik ryšių nutraukimui. Amorfiniai kūnai šildomi minkštėja palaipsniui plačiame temperatūrų intervale. Ryšio energija tarp dalelių skirtinga, todėl amorfiniai kūnai neturi apibrėžtos lydymosi temperatūros.

Kristaliniams kūnams būdinga savybė – anizotropija, t.y. įvairių mechaninių, fizinių, šiluminių ir kitų savybių priklausomybė nuo kristalografinių krypčių. Amorfiniai kūnai yra izotropiniai. Kristalų anizotropija apibūdinama vidinės struktūros ypatumais. Amorfinė būsena nėra stabili, ir tam tikrose sąlygose amorfiniai kūnai kristalizuojasi – pereina į tvarkingą būseną. Toks perėjimas vyksta savaime. Pavyzdžiui, žinoma, kad stiklas ilgai sensta – praranda tvirtumą, nes ima kristalizuotis.

Kristaliniais vadiname tokius kūnus, kuriuos sudarantys atomai arba molekulės erdvėje išsidėstę tam tikra tvarka, dažnai vadinama tolimąja tvarka. Kristaliniai kūnai skirstomi į monokristalinius ir polikristalinius. Polikristalinius kūnus sudaro daugybė susijungusių, netaisyklingai orientuotų monokristalėlių.

Amorfiniais vadiname tokius kūnus, kurių atomai ir molekulės išsidėsčiusios netvarkingai, nors ir pastebimas tam tikras (10 \AA atstumuose) tvarkingas išsidėstymas, dažnai vadinamas artimąja tvarka. Amorfinius kūnus galima nagrinėti kaip peršaldytus skysčius su dideliu klampumo koeficientu.

Daugelio mineralų ir brangakmenių kristalai buvo žinomi ir aprašyti prieš keletą tūkstantmečių. Dabartiniu metu žinomi ir saugomi kvarco kristalai, įkomponuoti japonų imperatorių karūnoje, pagamintoje 769 metais.

Pradžioje kristalu buvo vadinamas tik ledas, o vėliau ir kvarcas. Gilėjant pažinimui, kristalo sąvoka plėtėsi ir sudėtingėjo. Ilgai kristalai buvo randami tik uolienose. Vėliau pradėta juos auginti laboratorijose. Dabartiniu metu laboratorijose išauginti kristalai naudojami papuošalams gaminti, metalams ir kitoms medžiagoms apdoroti, mikroelektronikoje ir kitur [4].

1.1. Atomų sąveika kietuosiuose kūnuose

Susidarant kietajam kūnui, atsiranda tarpatominiai (cheminiai) ryšiai. Ryšio jėgos atsiranda dėl elektros krūvių sąveikos. Atsižvelgiant į ryšių prigimtį ypatumus, jie skirstomi į joninius, kovalentinius, metališkuosius ir molekulinis.

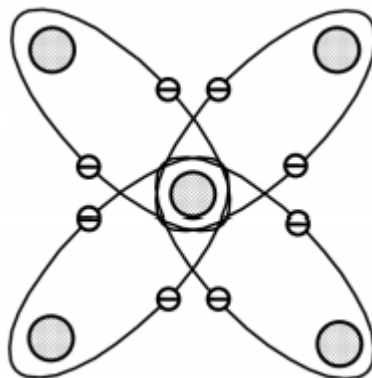
Joniniai ryšiai susidaro, kai vieno atomo valentiniai elektronai pereina į kitus atomus. Susidariusių priešingo krūvio jonų (pvz., Na^+ ir Cl^- jonų) tarpusavio elektrinė trauka ir lemia ryšį. Ryšio stiprumą nusako ryšio energija. Ryšio energija – tai kiekis energijos, kuri išsiskiria susidarant ryšiams. Joniniai ryšiai yra stiprūs. Jų ryšio energija siekia šimtus ir net tūkstančius kilodžaulių moliui. Todėl joniniai kristalai mechaniškai stiprūs, kieti, lydosi tik aukštose temperatūrose. Kadangi joniniuose kristaluose nėra laisvųjų elektronų, jiems būdingas tik nedidelis joninis laidumas.

Kai kurių medžiagų molekulėse (pvz., H_2 , O_2 , N_2 , ...) neutraliuosius atomus sieja kovalentiniai ryšiai. Kovalentinių ryšių prigimtį paaiškina kvantinė mechanika. Trumpai aptarkime kaip susidaro kovalentinis ryšys tarp dviejų vandenilio atomų.

Suartėjant dviem vandenilio atomams, didėja tikimybė, kad vieno atomo elektronas atsidurs greta kito atomo. Kai atstumas tarp atomų sumažėja iki 0,1 nm, jų elektronai tampa bendri. Jeigu elektronų sukinių yra priešingų ženklų, padidėja tikimybė rasti šiuos elektronus erdvėje tarp branduolių. Būdami tarp branduolių, elektronai, kaip neigiamieji krūviai, traukia teigiamus branduolius. Taip atsiranda kovalentinio ryšio jėga. Taigi kovalentiniai ryšiai atsiranda tada, kai susidaro bendros gretimoms atomams elektronų poros.

Kietuosiuose kūnuose kovalentiniai ryšiai vyrauja atominiuose kristaluose, turinčiuose deimanto tipo kristalinę gardelę. Deimantas sudarytas iš anglies atomų, turinčių po keturis

valentinius elektronus. Deimanto gardelėje kiekvieną atomą supa keturi artimiausieji atomai. Kovalentiniai ryšiai susidaro, atsiradus bendroms gretimų atomų valentinių elektronų orbitoms. Vieną orbitą užima du elektronai su priešingais sukinniais (1 pav.).



1 pav. Deimanto valentinių elektronų orbitos – supaprastintas (plokščiasis) modelis.

Šaltinis: Štaras S. Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai. Vilnius, 2005.

Deimanto tipo gardelė būdinga ir paprastiesiems puslaidininkiams – siliciui ir germaniui.

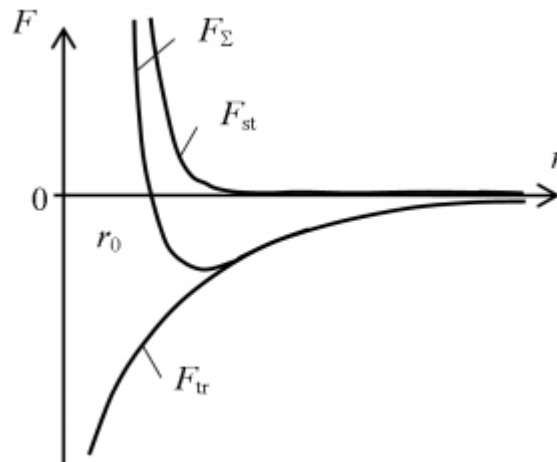
Kovalentinių ryšių energija didelė – šimtai kilodžaulių moliui. Todėl daugumai atominių kristalų būdingas didelis mechaninis atsparumas, kietumas, jų lydymosi temperatūros aukštos. Kadangi kovalentinio ryšio nuotolis nedidelis, atominiai kristalai yra trapūs. Pagal elektrines savybes deimantas laikomas izoliatoriumi, silicis ir germanis yra puslaidininkiai. Nedidelį elektrinį laidumą lemia tai, kad minėtuose kristaluose beveik nėra laisvųjų elektronų.

Metaluose tarp atomų dominuoja metališkieji ryšiai. Metalų atomams suartėjus, atomų valentiniai elektronai tampa laisvaisiais ir gali judėti tarp jonų – netekusių elektronų atomų. Neigiami elektronai traukia teigiamuosius jonus. Taip ir atsiranda metališkųjų ryšių jėgos.

Metališkųjų ryšių energija taip pat didelė – šimtai kilodžaulių moliui. Todėl dauguma metalų yra mechaniškai atsparūs, kieti, pasižymi aukštomis lydymosi temperatūromis. Metališkieji ryšiai nenutrūksta net tada, kai atomai gerokai pasislenka vienas kito atžvilgiu. Todėl metališkieji kristalai yra plastiški. Metaluose daug laisvųjų elektronų, todėl jiems būdingas didelis elektrinis laidumas.

Molekuliniai ryšiai (dėl Van der Valso, dispersinių jėgų, dipolinės sąveikos) susidaro kristaluose iš inertinių dujų atomų arba neutralių molekulių. Jie yra silpni. Kietieji kūnai, kuriuose vyrauja molekuliniai ryšiai, lengvai deformuojasi, lydosi žemose temperatūrose. Pagal

elektrines savybes jie – dielektrikai. Atomų traukos jėgos didėja, mažėjant atstumui tarp sąveikaujančių atomų (2 pav.).



2 pav. Tarpatominių jėgų priklausomybės nuo atstumo tarp sąveikaujančių atomų.
Šaltinis: Štaras S. *Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai*. Vilnius, 2005.

Pavyzdžiui, joninio ryšio atveju traukos jėga pagal Kulono dėsnį išreiškiama formule:

$$F_{tr} = \frac{q_1 q_2}{\epsilon r^2}; \quad (1)$$

Čia q – elementarusis krūvis ($q = |e|$, e – elektrono krūvis), ϵ – dielektrinė skvarba, r – atstumas tarp sąveikaujančių atomų.

Tačiau atomų traukos jėgos nėra vienintelės. Kai atstumas tarp atomų mažėja ir suartėja gretimų atomų elektronų apvalkalai, pradeda veikti atomų stūmos jėgos. Jos neleidžia vieno atomo elektronams išsiskverbti į kito atomo elektroninį apvalkalą. Mažėjant atstumui tarp atomų, stūmos jėga F_{st} sparčiai stiprėja (2 pav.). Esant tam tikram atstumui r_0 tarp atomų, traukos ir stūmos jėgos atsveria viena kitą, atstojamoji jėga F_{Σ} tampa lygi nuliui.

Nutolę atstumu r_0 vienas nuo kito atomai yra pusiausvyrosios būsenos. Todėl, susidarant kietajam kūnui, jie išsidėsto tvarkingai – atstumu r_0 vienas nuo kito. Jeigu susidaro tik artimoji tvarka, kietasis kūnas yra amorfinis. Jeigu tvarkinga vidinė struktūra yra visame kietajame kūne, tai jis yra kristalas. Toliau nagrinėsime tik kristalinius kietuosius kūnus [2].

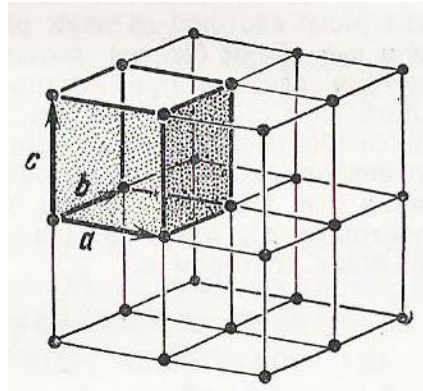
2. Kristalai

Kristalai – tai kietieji kūnai, turintys tvarkingą vidinę struktūrą. Juos sudaro tvarkingai susigrupavusios dalelės: atomai, jonai (įelektrinti atomai) arba molekulės (atomų junginiai).

Kristalai susidaro iš tirpalų aušinant išlydytą kietąją medžiagą, o šis susidarymo procesas vadinamas kristalizacija. Susidarant kristalui, jo atomai, jonai ir molekulės tvarkingai išsidėsto lygiagrečiomis eilėmis, kurių grupės sudaro kristalų gardeles. Gardelė lemia kristalo formą. Kai prie jos jungiasi daugiau atomų, jonų ar molekulių, kristalas auga. Pats mažiausias tūris, tiksliai pasikartojantis visame kristale, vadinamas elementariuoju narveliu. Kristalą sudaro narvelių kombinacijos. Druska ir cukrus turbūt yra žinomiausios kristalinės medžiagos, bet pavyzdžiui molis ar pienas irgi susideda iš kristalų. Daugelio gamtinių medžiagų kristalinę sandarą sunku įžiūrėti, nes kristalai dažniausiai būna sulipę [4]. Kristalų simetrijos elementai yra ašys, plokštumos ir centrai. Pagal šių elementų kombinacijas, kristalai gali būti priskiriami vienai iš septynių kristalografinių sistemų: kubinei, tetragoninei, rombinei, monoklininei, heksagoninei, romboedrinei (arba trigoninei) ar triklininei. Pavyzdžiui, visų kubinei sistemai priskirtų medžiagų kristalai yra kubo formos (druska, piritas), o rombinei – rombo formos (kvarcas, topazas). Tačiau dažnai kristalai turi defektų – suauga, neturi viršūnių ir t. t., todėl atrodo labai skirtingi. Kai kurios medžiagos turi polimorfinių savybių. Tai reiškia, kad jos gali turėti kelias skirtingos struktūros atmainas ir sudaryti kelias stabilias gardeles. Dar viena kristalų forma – skystieji kristalai. Tai medžiagos, sudarytos iš pailgų molekulių, kurios tam tikrame temperatūrų diapazone pasižymi ir skysčiams būdingu tankumu, ir kristalams būdinga molekulių išsidėstymo tvarka. Skystųjų kristalų molekulės yra išsidėsčiusios tvarkingai kaip ir kietųjų kristalų dalelės. Skystieji kristalai naudojami termometruose, laikrodžiuose, skaičiuotuovuose, monitoriuose ir kituose elektronikos prietaisuose. Skystuosius kristalus atrado austrų botanikas F. Reinitzer (*Rheinitzer*) dar 1888 m. Nors skystieji kristalai žinomi jau seniai, tačiau iki 60-ųjų mūsų amžiaus metų skysti kristalai niekaip nebuvo naudojami. 1963 m. Amerikiečių mokslininkas Viljamsas (*Williams*), dirbęs RCA (*Radio Corporacion of America*) firmoje, pastebėjo, kad paveikus skystąjį kristalą elektriniu lauku, šviesos sklidimas per jį pasikeičia. Po penkerių metų kitas RCA tyrinėtojas Hylmejeris (*Heilmeyer*) ir jo kolegos pagamino pirmą skystųjų kristalų ekrano prototipą. Kristalus nagrinėjantis mokslas vadinamas kristalografija. Kristalai tyrinėjami naudojant rentgenokristalografijos metodą – kristalo struktūra nustatoma naudojant Rentgeno spindulius. Rentgenokristalografija naudojama mineralams, lydiniams ir genetikams svarbiai DNR struktūrai tirti [4].

2.1. Kristalinės gardelės

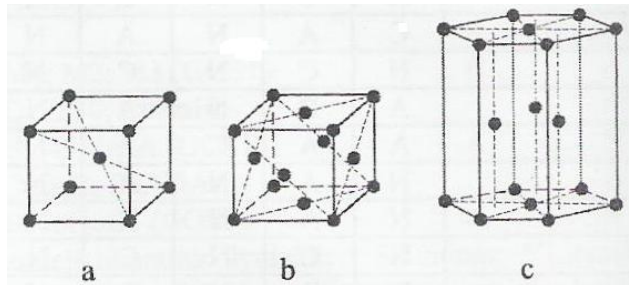
Aiškinantis vidinę kristalų struktūrą, jie modeliuojami kristalinėmis gardelėmis. Kristalinė gardelė – tai erdvinis tinklelis, kurio mazgai sutampa su kristalo atomų arba molekulių centrais. Kristalinę gardelę sudaro elementarieji narveliai (3 pav.).



3 pav. Elementarusis kristalinės gardelės narvelis.

Šaltinis: Куммель Ч. Введение в физику твердого тела. Москва, 1978.

Bendruoju atveju elementariojo narvelio briaunos yra nevienodo ilgio ir kertasi skirtingais kampais. Trūkais ir lygiagrečiais poslinkiais kartojant (transliuojant) elementarųjį narvelį, susidaro erdvinė gardelė.

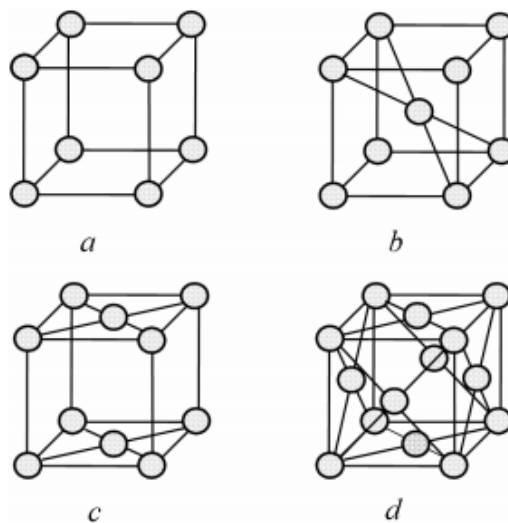


4 pav. Pagrindiniai elementariųjų gardelių tipai: a – kubinė centruotojo tūrio, b – kubinė centruotojo paviršiaus, c – heksagoninė tanki.

Šaltinis: Šniuolis R. Inžinerinės medžiagos. Šiauliai, 2004.

Jeigu gardelės mazgai yra tik elementariojo narvelio viršūnėse (5 pav., a), tai toks narvelis vadinamas paprastuoju, arba primityviuoju, o pati gardelė – paprastąja, arba primityviąja. Kiekvienam paprastam narveliui tenka vienas mazgas.

Kartais kristalo sandara ir simetrija geriau išryškėja nagrinėjant ne paprastąjį, o sudėtingą narvelį, kuriame mazgai yra ne tik viršūnėse. Sudėtingi kubiniai narveliai pavaizduoti 5 pav., b – d. Centruotojo tūrio narvelyje (5 pav., b), be mazgų narvelio viršūnėse, yra mazgas jo centre. Centruotojo pagrindo narvelyje (5 pav., c) papildomi mazgai yra dviejų priešingų sienelių centruose, centruotojo paviršiaus narvelyje (5 pav., d) – kiekvienos sienelės centre.

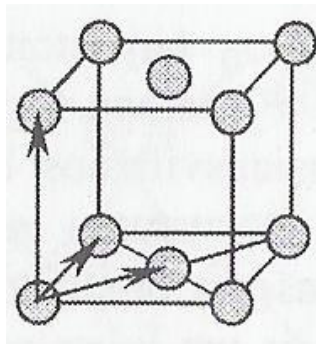


5 pav. Paprastasis (a) ir sudėtingieji (b – d) kubiniai narveliai.

Šaltinis: Štaras S. *Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai*. Vilnius, 2005.

1848 m. O. Bravė (*Bravais*) įrodė, kad gali būti tik 14 skirtingų erdviųjų kristalinių gardelių. Todėl kristalinės gardelės dar vadinamos Bravės gardelėmis.

Kristalo gardelėje visada galima rasti paprastąjį narvelį. Sudarytos iš sudėtingųjų narvelių gardelės kartu yra ir paprastosios gardelės. Tuo galima įsitikinti atitinkamai parinkus vektorius (6 pav.).

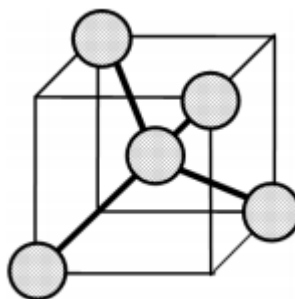


6 pav. Paprastojo narvelio vektorių kryptys centruotojo pagrindo narvelyje.

Šaltinis: Štaras S. *Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai*. Vilnius, 2005.

Paprasciausiai atveju gardelės mazguose yra pavienių atomų. Tačiau juose gali būti kelių atomų arba molekulių grupių. Tokia grupė vadinama struktūros elementu arba baze. Taigi, norint išsamiai apibūdinti kristalo sandarą, dar reikia nurodyti, kaip sudaryta bazė.

Paprastiems puslaidininkiams – germaniui ir siliciui – būdinga deimanto tipo gardelė. Deimanto tipo gardelės bazė sudaryta iš dviejų atomų. Šią gardelę galima įsivaizduoti kaip dvi sudarytas iš vienodų atomų ir įstatytas viena į kitą centruotojo paviršiaus kubines gardeles, perstumtas viena kitos atžvilgiu per ketvirtį tūrinės įstrižainės. Kiekvieną atomą deimanto tipo gardelėje supa keturi artimiausi atomai. Jų išsidėstymas erdvėje parodytas 7 pav.



7 pav. Deimanto tipo gardelės narvelio fragmentas.

Šaltinis: Štaras S. Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai. Vilnius, 2005.

Sudėtinių puslaidininkių, sudarytų iš periodinės elementų sistemos trečiosios ir penktosios grupės elementų, gardelės bazė sudaryta iš dviejų skirtingų atomų (pvz., Ga ir As). Sudėtinių puslaidininkių kristalų gardeles galima įsivaizduoti kaip dvi skirtingų atomų centruotojo paviršiaus gardeles, įstatytas viena į kitą ir perstumtas viena kitos atžvilgiu per ketvirtį tūrinės įstrižainės. Tokios gardelės vadinamos cinko blizgio (ZnS) arba sfalerito tipo gardelėmis. Šiose gardelėse vieno tipo atomą supa keturi artimiausi kito tipo atomai [2].

2.2. Svarbiausios specifinės kristalų savybės

Medžiagos dalelių išsidėstymas sudarant erdvines gardeles lemia kristalų savybes. Svarbiausios iš jų yra vienalytiškumas, anizotropiškumas, gebėjimas išlaikyti taisyklingą formą.

Vienalytiškumas pasireiškia tuo, kad kristalo savybės (spalva, kietumas, skalumas, šilumos laidumas ir kt.) yra vienodos visuose jo taškuose. Tačiau dėl atominės medžiagos sandaros šį teiginį reikia patikslinti. Iš tikrųjų kristalo savybės bet kokiame taške, kuriame yra

vien cheminio elemento atomas, bus kitokios negu savybės taške, kuriame yra kito cheminio elemento atomas.

Remiantis įvairių kristalų vidaus sandaros tyrimo duomenimis sakoma, kad kristalą (ir kitoki kūną) galime laikyti vienalyčiu, jeigu kiekvienam jo viduje paimtam taškui yra kitas visai analogiškų savybių taškas ir atstumas tarp tų taškų yra labai nedidelis – mažesnis kaip 50 angstromų ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$).

Kristalų vienalytiškumą tyrinėtojai seniai pastebėjo – dar viduramžiais arabų alchemikai naudojo kristalizaciją, kad gautų chemiškai švarias vienalytes druskas.

Kartais kristaluose pasitaikantys mechaniniai įtarpai (dujų burbulėliai, skysčių lašeliai ar kietųjų kūnų dalelės) vienalytiškumo sampratai neprieštarauja, nes tai tik atsitiktinai kristalui augant patekusios mechaninės priemonės, kurios į kristalo vidaus sandarą neįeina ir jos neveikia.

Kristalų anizotropiškumas pasireiškia tuo, kad jų fizikinės savybės (spalva, kietumas, skalumas, šilumos, elektros laidumas, šviesos sklaidimo greitis ir kitos) lygiagrečiomis kryptimis visada yra vienodos, o nelygiagrečiomis kryptimis gali būti skirtingos. Tai priklauso nuo kristalo vidaus sandaros – atstumai tarp atomų (jonų) kristalų struktūrose lygiagrečiomis kryptimis visuomet būna vienodi, o nelygiagrečiomis – gali būti skirtingi.

Pavyzdžiui, $\text{KAl}_2 \cdot [(\text{OH},\text{F})_2\text{AlSi}_3\text{O}_{10}]$ (žėručiui – muskovitui) būdingas skalumo anizotropiškumas, o $\text{Al}_2[\text{O}|\text{SiO}_4]$ – distenui (kianitui) – kietumo. Disteno pailgos prizmiškos formos kristalai įvairiose vietose yra skirtingo kietumo (išilgai kristalo ilgosios ašies kietumas mažesnis – 4,5, peilis brėžia, o jai statmena kryptimi yra didesnis – 6, peilis nebrėžia).

Iš kubo formos halito (valgomosios druskos) kristalo įvairiose jo vietose išpjovus pailgus strypelius, reikės skirtingos jėgos jiems perlaužti. Lengviausiai perlaužiamas statmenai kubo sienelėms išpjautas strypelis – 570 g/mm^2 stiprumo jėga. Kad perlaužtume strypelį, išpjautą nuo vienos briaunos link kitos, reikės 1150 g/mm^2 stiprumo jėgos, o nuo vieno trisienio kampo link kito – 2150 g/mm^2 .

Amorfinėms medžiagoms ši savybė nebūdinga, nes paprastai jos yra izotropinės.

Kristalų savybė išlaikyti taisyklingą formą pasireiškia tuo, kad iš bet kurios kristalo nuolaužos ar rutulėlio, esant tinkamoms aplinkos sąlygoms (temperatūrai ir slėgiui), persotintame tos medžiagos tirpale ilgainiui užauga taisyklingų daugiasienių formos kristalai. Pavyzdžiui iš NaCl – halito (valgomosios druskos) kubo formos kristalo išskaptuotą rutulėlį arba nuolaužą panardinę į persotintąją valgomosios druskos tirpalą, užauginsime taisyklingą kubo formos

daugiasienį. Ši savybė būdinga tik kristalams. Kartais prie svarbiausių kristalo savybių priskiriama ir pastovi lydymosi temperatūra [5].

2.3. Kristalų klasifikacija pagal cheminio ryšio tipą

Kristalą sudaro tarpusavyje sąveikaujančios struktūrinės dalelės: atomai, jonai, molekulės ir kt. Šių dalelių suardymo energija yra žymiai didesnė negu tarpusavio traukos energija. O pastaroji yra didesnė už dalelės vidutinę šiluminio judėjimo energiją – kitaip kristalas išsilydytų ar net sublimuotų.

Tarp kristalo struktūrinių dalelių vienu metu veikia traukos ir stūmos jėgos. Kristalo susidarymą sąlygoja traukos tipo sąveika. Ji gali būti įvairios prigimties: joninė, van der Valso, kovalentinė ir kitokia. Konkrečiame kristale ji gali būti ir mišri, t. y. arba iš karto veikia kelios sąveikos rūšys, arba turi kelių sąveikų požymius. Pagal dominuojančią traukos sąveikos rūšį kristalai skirstomi į joninius, kovalentinius, molekulinus, metališkuosius, vandeniliškuosius (1 lentelė).

1 lentelė

| Kristalo tipas | Pavyzdys | Ryšio energija (J/mol) | Šio tipo kristalo savybių charakteristika |
|-----------------|--------------------------|------------------------|--|
| Joninis | NaCl | 180 | Žemose temperatūrose mažas elektrinis laidumas, aukštose temperatūrose didelis joninis laidumas, selektyvi infraraudonojo spinduliavimo absorbcija |
| | LiF | 240 | |
| Kovalentinis | Deimantas | 170 | Didelis kietumas, grynų kristalų žemose temperatūrose mažas elektrinis laidumas |
| | SiC | 283 | |
| Metališkasis | Na | 26 | Didelis elektrinis laidumas, didelis skalumas |
| | Fe | 94 | |
| Molekulinis | Ar | 1,8 | Žema lydymosi ir virimo temperatūra, didelis spūdumas |
| | CH ₄ | 2,4 | |
| Vandeniliškasis | H ₂ O (ledas) | 1,2 | Pasižymi polinkiu polimerizacijai |
| | HF | 7 | |

Šaltinis: Tamašauskas A., Vosylius J., Požela I. *Fizika 4. Vilnius, 1995.*

Pažymėkime, kad nasaŕveikaujančių dalelių potencinę energiją laikome lygią 0, tuomet dėl traukos ji yra neigiama, o dėl stūmos – teigiama.

Kristalo struktūrinių dalelių stūma gali būti elektromagnetinės prigimties. Čia nemažą reikšmę turi atomų branduolių elektrostatinė stūma. Be to, suartinus du nesužadintus atomus (molekules), vienoje erdvės dalyje atsidurtų abiejų jų vienodų būsenų elektronai. Tam prieštarauja Paulio principas ir dėl to bent vieno sąveikaujančio atomo išorinis elektronas (arba keli jų) pereina į didesnės energijos būseną. Dalelių sąveikos energijos padidėjimas ekvivalentus stūmos jėgų tarp jų pasireiškimui. Šios sąveikos energija priklausomai nuo nuotolio r tarp sąveikaujančių dalelių aprašoma teigiama funkcija $W_1 = \text{const}/r^2$, arba atitinkamo laipsnio eksponente. Daugeliui kristalų dydis n yra intervale $11 \leq n \leq 12$. Taigi stūmos jėgos palyginti su gravitacinėmis bei kuloninėmis yra trumpasiekės ir ženkliai pasireiškia tik suartėjus dalelėms arčiau negu jų normalus nuotolis kristale r_0 .

Kai kristale tarp gretimų struktūrinių dalelių centrų nuotolis $r = r_0$, traukos jėgos atsveria stūmos jėgas. Nepaisant to, šių sąveikų energijos moduliai nelygūs: nuotolyje $r = r_0$ dominuoja traukos potencinė energija. Dėl to kiekvienos kristalo dalelės pilnutinė sąveikos energija yra neigiama ir dalelė yra potencialo duobėje. Ši būseną kristalui energetiškai yra palanki. Jei kristalo visų nasaŕveikaujančių dalelių pilnutinė energija W , o sąveikaujančių – W' , tai $W' < W$. Dydis $\Delta W = W - W'$ vadinamas kristalo cheminio ryšio energija. Ryšio stiprumą nusako specifinė ryšio energija. Pastaroji apskaičiuojama arba vienam moliui ir išreiškiama J/mol vienetais, arba energija vienai molekulei. Tuomet jos matavimo vienetas dažniausiai yra eV/molekulei (1 eV/molekulei = $9,65 \cdot 10^4$ J/mol). Specifinė ryšio energija kinta maždaug nuo 0,1 iki 7 eV/molekulei. Šio intervalo ribinės vertės nusako atitinkamai silpną ir stiprų ryšį. Kai specifinė cheminio ryšio energija yra 1 eV/molekulei eilės, jį laikome vidutinio stiprumo.

Nesudėtingi skaičiavimai rodo, kad atomų bei molekulių gravitacinės ir magnetinės sąveikos energija yra nepalyginamai mažesnė už bandymais nustatytą cheminio ryšio energiją. Taigi cheminis ryšys kristale nuo šių sąveikų nepriklauso. Jį lemia elektromagnetinė arba kvantmechaninė sąveika [3].

2.4. Kristalų defektai

Realiuosiuose kristaluose būna defektų. Kristalų defektai – tai monokristalų periodinės sandaros pažeidimai. Defektai skirstomi į dinامينius ir statinius.

Dinaminiai defektai pasireiškia dėl kristalinės gardelės mazgų šiluminių virpesių apie pusiausvyros padėtis. Įrodoma, kad kristalo gardelės virpesių energiją W_k galima išreikšti normaliuųjų (nepriklausomųjų) virpesių energijų suma:

$$- \quad (2)$$

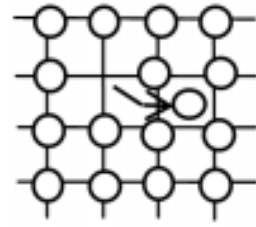
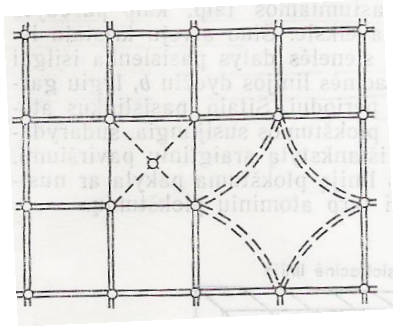
čia ω_i – normaliuųjų i -ojo tipo virpesių dažnis, n_i – sveikasis skaičius.

Iš formulės aišku, kad tam tikro tipo virpesių energija gali keistis tik kvantais $\hbar\omega_i$, kurie vadinami fononais. Fononą galima laikyti kvazidalele (lot. *quasis* – beveik, tartum), kurios energija $\hbar\omega_i$, o impulsas – ; čia - —, h – Planko (*Planck*) konstanta, — – bangos skaičius, v – virpesių sklidimo greitis. Remiantis fonono sąvoka, daugeliu atvejų kristalą galima nagrinėti kaip kvazidalelių – fononų – sistemą. Fononų sistemos energija lygi kietojo kūno virpesių energijai.

Statiniai kristalų defektai gali atsirasti auginant kristalą. Jie skirstomi į nulinius, vienmačius, dvimačius ir trimačius [2].

2.4.1 Taškiniai kristalų defektai

Nuliniai, arba taškiniai, kristalo defektai gali atsirasti aukštoje temperatūroje. Atomų šiluminių virpesių energija kristale pasiskirsto netolygiai. Kai kurie atomai gali įgyti tiek energijos, kad jos pakanka suardyti ryšiams su gretimais atomais. Tokie atomai kristale išleikia iš gardelės mazgo. Kristale atsiranda tuščias mazgas (vakansija) ir tarp mazgų dislokuotas atomas (8 pav.). Tokio tipo defektai vadinami Frenkelio defektais.

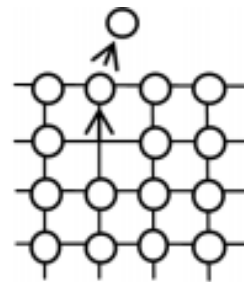
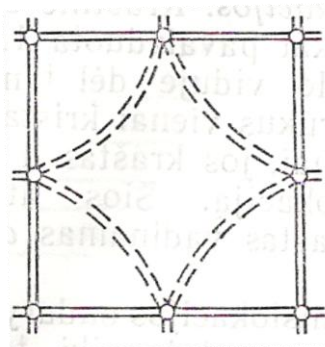


8 pav. Frenkelio defektai dvimatėje gardelėje.

Šaltinis: Tamašauskas A., Vosylius J., Požela I. Fizika 4. Vilnius, 1995.

Šaltinis: Štaras S. Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai. Vilnius, 2005.

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. Vakansija gali atsirasti, išgaravus atomui aukštoje temperatūroje iš kristalo paviršinio sluoksnio. Todėl ji gali skverbtis į kristalą (9 pav.). Tokio tipo defektai vadinami Šotkio (*Schottky*) defektais.

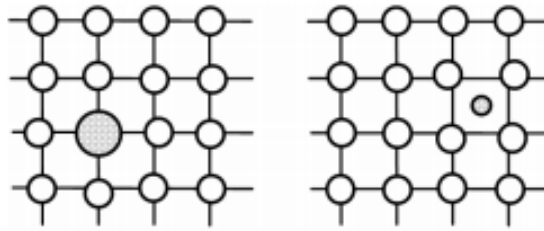


9 pav. Šotkio defektai dvimatėje gardelėje.

Šaltinis: Tamašauskas A., Vosylius J., Požela I. Fizika 4. Vilnius, 1995.

Šaltinis: Štaras S. Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai. Vilnius, 2005.

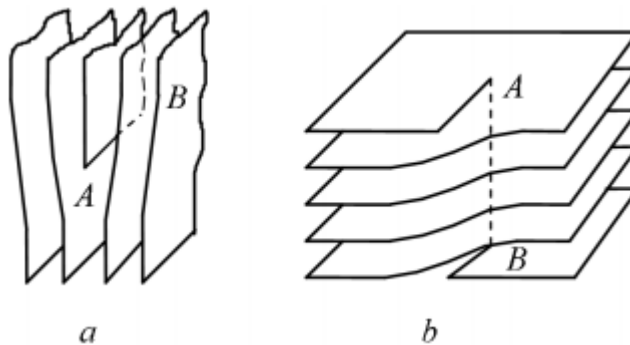
Taškinių defektų priežastis dar gali būti kito tipo – priemaišų – atomai arba jonai gardelės mazguose arba tarpmazgiuose (10 pav.).



10 pav. Priemaišinių atomų sukelti defektai.

Šaltinis: Štaras S. Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai. Vilnius, 2005.

Vienmačiai, arba linijiniai, defektai dar vadinami dislokacijomis. Dislokacijos apima kelių šimtų ar tūkstančių gardelės periodų sritis. Kristalo viduje nutrūkus vienai kristalo atominėi plokštumai, susidaro kraštinė dislokacija (11 pav., a), kurios ašis yra atominės pusplokštumos kraštas AB.



11 pav. Atominių plokštumų defektai kraštinės (a) ir sraigtinės (b) dislokacijų atvejais.

Šaltinis: Štaras S. Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai. Vilnius, 2005.

Dėl vienos kristalo dalies šlyties kitos kristalo dalies atžvilgiu atsiranda sraigtinė dislokacija. Sraigtinės dislokacijos atveju atominės plokštumos susijungia, sudarydamos sraigtinį paviršių (11 pav., b). Aplink sraigtinės dislokacijos ašį AB plokštuma kyla arba leidžiasi sraigto žingsniu, lygiu atstumui tarp atominių plokštumų [2].

2.4.2. Šiluminiai taškiniai defektai

Pagal statistinę fiziką kristalo atomo šiluminio judėjimo vidutinė energija $\langle W \rangle$ yra kT eilės: čia k – Bolcmano konstanta, T – kristalo absoliutinė temperatūra. Kambario temperatūroje

($T \sim 300 \text{ K}$) dydis $\langle W \rangle$ yra — eV eilės. Tačiau pagal statistinę fiziką bet kokioje temperatūroje kristale visuomet yra atomų, kurių energija W gerokai viršija jos vidutinę vertę. Tokių atomų koncentracijos priklausomybę nuo temperatūros aprašome Maksvelio ir Bolcmano dėsnium. Atsižvelgiant į šio pasiskirstymo tikimybinį pobūdį, kiekvienas atomas gali įgauti energiją $W \gg \langle W \rangle$. Toks atomas gali ištrūkti iš savo pusiausvyros padėties kristale ir, įveikęs jį supančių kitų atomų sudarytą potencialinį barjerą, peršokti į naują pusiausvyros padėtį. Jei visi jam gretimi gardelės mazgai yra atomų užimti, jis atsiduria tarpmazgyje. Kai toks atomas dislokuojasi toli nuo pirminės vietos, susidaro du kristalo defektai: į tarpmazgį įterptas atomas ir Šotkio defektas (vakansija). Tačiau kai toks atomas dislokuojasi arti pradinės vietos – tuomet turime Frenkelio defektą.

Aprašytieji struktūriniai taškiniai defektai susidaro dėl kristalo atomų šiluminio judėjimo, todėl jie dar vadinami šiluminiais taškiniais defektais. Aptarkime jų koncentraciją. Ji priklauso nuo kristalo prigimties ir nuo defekto susidarymui reikalingos energijos. Sakykime, vakansijai (Šotkio defekto) susidaryti reikalingas ΔW_S didumo energijos kiekis. Šis dydis priklauso nuo kristalo prigimties bei temperatūros ir yra elektronvolto ar keletu dešimčių eV eilės. Pagal Maksvelio ir Bolcmano dėsnį šiluminių Šotkio defektų koncentracija yra šitokia:

$$\text{---} \quad (3)$$

čia N – gardelės mazgų koncentracija.

Atitinkamai šiluminių Frenkelio defektų koncentracija išreiškiama taip:

$$\text{---} \quad (4)$$

čia N' – tarpmazgių koncentracija, ΔW_F – Frenkelio defekto susidarymo energija. Kristale vienu metu gali būti ir Frenkelio, ir Šotkio defektai. Tačiau vyrauja tie, kurių susidarymui reikalinga mažesnė energija.

Defektų susidarymo kristale procesas vadinamas jų generavimu. Šiluminių defektų generavimo tikimybė ne visose kristalo vietose yra vienoda. Ji didžiausia kristalo paviršiuje, kristalitų sandūrose, ties mikroplyšiais, prie dislokacijų ar pašalinių atomų. Šiose vietose yra susilpnėję tarpatominiai ryšiai ir todėl yra mažesnė šiluminių defektų susidarymo energija.

Tiek vakansijos, tiek tarpmazgyje esantys atomai kristale migruoja. Toks atomas, atsidūręs ties vakansija, gali ją užimti – išnyksta abu defektai. Šis reiškinys vadinamas defektų rekombinacija. Laiko tarpas nuo defekto susidarymo iki rekombinacijos vadinamas defekto

gyvavimo trukme. Nekintant temperatūrai, tarp defektų generavimo ir rekombinacijos nusistovi pusiausvyra ir jų koncentracija laikui bėgant nekinta.

Dydžiai ΔW_S ir ΔW_F nustatomi tiriant kristalų joninį laidumą. Žinant jų vertes, įvertinama šiluminių defektų koncentracija. Taip buvo nustatyta, kad kambario temperatūroje vakansijų koncentracija yra 10^{10} cm^{-3} . Iš (3) formulės išplaukia, kad labai žemose temperatūrose vakansijų neturėtų būti, tačiau iš tikrųjų yra kitaip. Mat žeminant temperatūrą kristalas turėtų artėti prie idealiosios struktūros ir jo tarpmazgiuose atsidūrusios dalelės rekombinuoti su vakansijomis. Tačiau tarpmazgio dalelė yra tam tikro gilumo potencialo duobėje, todėl minėtai rekombinacijai gauti reikalinga tam tikro didumo šiluminė energija. Žemose temperatūrose daugeliui tokių dalelių šios energijos trūksta ir tuomet kristalo defektinė būseną „iššala“. Todėl žemose temperatūrose kristale esti gana didelė „iššaldytų“ šiluminių defektų koncentracija. Ji yra tuo didesnė, kuo buvo aukštesnė kristalo temperatūra ir kuo sparčiau ji buvo mažinama. Sparčiai šaldant kristalą, dėl sumažėjusio tarpmazgyje esančių atomų (jonų) judrumo jie turi labai mažai laiko atgaliniam grįžimui į vakansijas [3].

2.4.3. Radiaciniai kristalų defektai

Kristalą apšaudant didelės energijos dalelių (protonų, neutronų, jonų) srautu arba švitinant kietaisiais elektromagnetiniais spinduliais, taip pat susidaro taškiniai defektai. Dalis energijos, perduotos tokioms detalėms arba spinduliavimo gardelės atomams (jonams), sunaudojama jų ryšiams nutraukti. Tokiu būdu sukurtieji defektai vadinami radiaciniais. Paprasčiausias radiacinis defektas yra Frenkelio defektas. Jam susidaryti reikalinga apie 14 – 35 eV energijos.

Neretai kristalai apšaudomi dalelėmis, kurių kinetinė energija yra dešimčių MeV didumo. Tuomet kristalo atomui gali būti perduota dešimčių keV energija, šimtus ir tūkstančius kartų viršijanti defekto susidarymo energijos slenkstį. Tokios didelės energijos atomui judant kristale, išilgai judėjimo trajektorijos (keleto šimtų Å ilgio atkarpoje) sukuriama šimtai ir tūkstančiai taškinių defektų bei jų santalkų. Nutraukus kristalo švitinimą, radiaciniai defektai rekombinuoja t. y. jų koncentracija mažėja. Taigi radiaciniai defektai yra nepusiausvyrieji defektai [3].

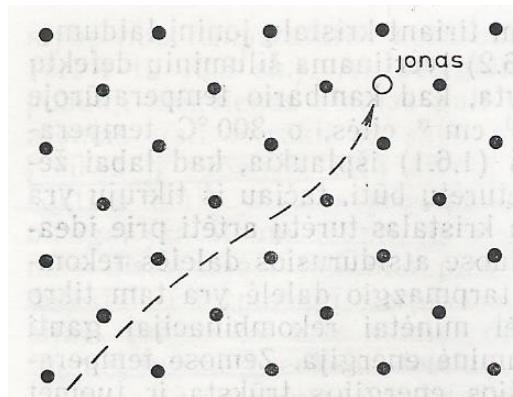
2.4.4. Priemaišiniai defektai

Labai svarbūs realiųjų kristalų taškiniai defektai yra pašaliniai atomai, t. y. priemaišos. Jų yra kiekviename kristale. Priemaišų dalį galima sumažinti tik taikant specialius fizikinius medžiagų gryninimo metodus, bet vistiek gryniausio kristalo 1 cm^3 tūryje lieka mažų mažiausiai 10^{15} priemaišinių atomų, kitaip sakant, kube, kurio briauna lygi 200 gardelės konstantų, vidutiniškai esti po 1 priemaišinį atomą. Nuo priemaišų labai priklauso puslaidininkių elektrinis laidumas, kontaktiniai ir kiti reiškiniai.

Dirbtinis priemaišų įterpimas į kristalą dar vadinamas legiravimu. Stipriai legiruotuose puslaidininkiuose priemaišų koncentracija yra 1%, tačiau dažniausiai būna $10^{-6} - 10^{-4}\%$ eilės.

Yra įvairių puslaidininkių legiravimo būdų. Vienas jų – auginti kristalus iš lydalo, tirpalo ar dujinės fazės, esant atitinkamai legiruojančių elementų koncentracijai.

Legiruotieji elementai į puslaidininkį gali būti įterpiami termodifuzijos būdu, taip pat apšaudant jį legiruojančiųjų elementų jonais. Šis būdas dar vadinamas jonų implantacija. Jonų įsiskverbimo gylis priklauso nuo jų energijos. 10 – 100 keV energijos jonai prasiskverbia į kristalą iki 0,01 – 1 μm . Tačiau tam tikra kryptimi jonais apšaudant monokristalą, gali būti pasiektas žymiai didesnis gylis. Tokia kryptimi jonas išilgai atominių eilių juda tarytum kanalu (12 pav.).



12 pav. Ašinis kanalavimas.

Šaltinis: Tamašauskas A., Vosylius J., Požela I. Fizika 4. Vilnius, 1995.

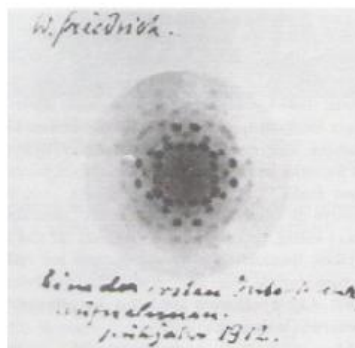
Čia jonas su atomais susiduria tik šliaužiamai, dėl to jo judesio kiekis praktiškai nepakinta ir jonas toliau juda ta pačia kryptimi. Šitoks atvejis vadinamas ašiniu kanalavimu. Tačiau jonai monokristale gali judėti ir tarp dviejų atominių plokštumų – tada yra plokštuminis kanalavimas.

Joninės implantacijos būdu į puslaidininkius galima įterpti gana tikslią beveik visų cheminių elementų jonų dozę, taigi galima pagaminti reikiamų parametru puslaidininkinius prietaisus.

3. Rentgeno (x – ray) spinduliuotė. Jos gavimas ir registracija

Nors pagrindiniai kristalografijos rezultatai buvo gauti dar XIX a., iš esmės jie rėmėsi tik eksperimentiniais kristalų morfologijos tyrimais, o periodinė vidinė kristalų struktūra tebuvo teorinė hipotezė. Vidinė atominė kristalų struktūra eksperimentiškai buvo atskleista tik XX a. pradžioje.

Pagrindinis instrumentas, kuriuo nustatoma kristalų atominė sandara, yra Rentgeno spindulių, arba X – spindulių (*X-rays*), difrakcija. Pirmieji X – spindulių difrakciją stebėjo von Laue, Knipping`as ir Friedrich`as 1912 m. (13 pav.).



13 pav. Viena pirmųjų Rentgeno spindulių difrakcijos kristale nuotraukų.

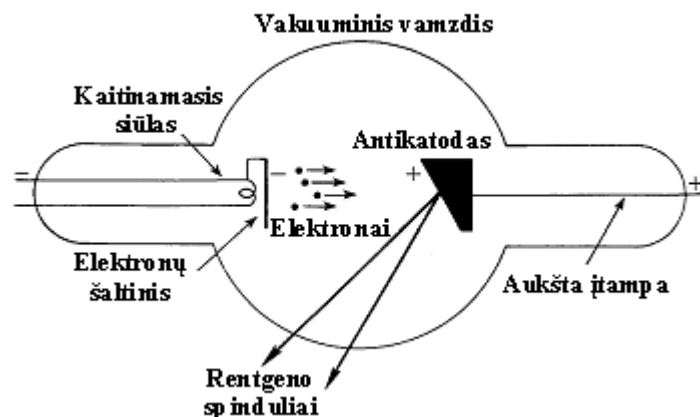
Šaltinis: Karazija R. Fizika humanitarams. Šiuolaikinė fizika II. Vilnius, 1997.

Istoriškai šis eksperimentas buvo svarbus visų pirma kaip Rentgeno spindulių elektromagnetinės prigimties eksperimentinis įrodymas. Jei X – spinduliai yra elektromagnetinės bangos, jie turi elgtis kaip optiniai spinduliai: lūžti, atsispindėti, difraguoti ir t. t. Tačiau šie efektai nebuvo stebimi. Tai galima atremti teiginiu, kad Rentgeno spindulių bangos ilgis yra labai mažas, tad difrakcija galima tik nuo labai siaurų, angstreminių plyšių. Laue pirmasis iškėlė idėją, kad kristalai, turint omenyje jų periodiškumą tarpatominiais atstumais, gali pasitarnauti kaip natūrali difrakcinė gardelė X – spinduliams, o Kipping`as ir Friedrich`as pirmieji realizavo šią

idėją. Taip buvo eksperimentiškai įrodyta ir elektromagnetinė Rentgeno spindulių prigimtis, ir pagrįsta kristalų vidinės periodinės struktūros hipotezė.

Šis eksperimentas buvo esminis žingsnis kietųjų kūnų fizikoje, netrukus atvedęs prie rentgenostruktūrinės kristalų analizės metodo sukūrimo [1].

Rentgeno spinduliai vadinamos elektromagnetinės bangos, kurių bangos ilgis $\lambda = 80 \cdot 10^{-2}$ nm. Iš šių spindulių spektrų galima nustatyti giliųjų elektronų sluoksnių pasiskirstymą atomuose ir atomų branduolių krūvius.



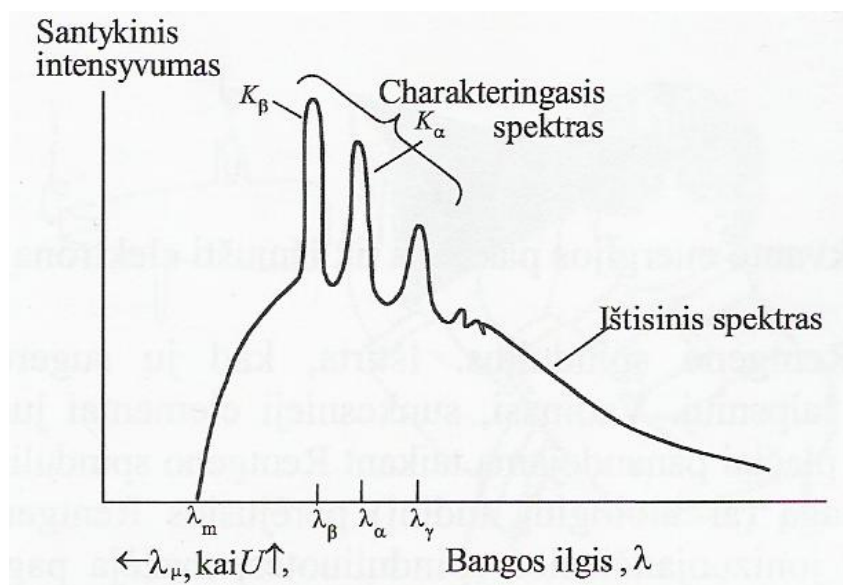
14 pav. Rentgeno vamzdžio schema.

Šaltinis: Karenauskaitė V., Bagdonas S. ir kiti. Biomedicinos fizika kolegijų studentams. Vilnius, 2002.

Rentgeno spinduliuotė gaunama taip vadinamame Rentgeno vamzdyje (14 pav.), antikatodo medžiagos atomų branduolių ir elektronų elektrostatiniu lauku stabdant elektringąsias daleles (elektronus). Kaitinamuoju siūlu įkaitinus katodą, iš jo spinduliuojamas elektronų srautas. Anodas, dažnai dar vadinamas antikatodu, turi pasvirusį paviršių, kad nukreiptų susidariusią Rentgeno spinduliuotę tam tikru kampu. Antikatodas gaminamas iš šilumai laidžios medžiagos, o jo paviršius padengiamas sunkiai besilydančiomis medžiagomis (paprastai didelio masės skaičiaus elementais, pavyzdžiui, volframu). Tarp katodo ir antikatodo prijungiama keliasdešimties tūkstančių voltų įtampa; susidaręs elektrinis laukas labai įgreitina elektronus ir suteikia jiems didelę kinetinę energiją. Pasiekusius anodą elektronus jo medžiaga smarkiai stabdo, tokiu būdu jų kinetinė energija virsta elektromagnetinių bangų energija, – atsiranda elektromagnetinis Rentgeno spinduliavimas.

Stabdant elektronus, dalis jų energijos sunaudojama Rentgeno spinduliuotei gauti, o kita dalis virsta antikatodo šilumine energija. Todėl dažnai naudojamas besisukantis antikatodas, kad jis neperkaistų dėl elektronų suteiktos šiluminės energijos pertekliaus.

Kol įtampa vamzdyje, o tuo pačiu ir elektronų energija nepasiekia tam tikros vertės, Rentgeno spinduliuotę skleidžia patys stabdomi elektronai. Kadangi šiluma virsta nevienoda jų energijos dalis, atsirandančių spindulių energija, taigi ir bangos ilgiai, taip pat būna skirtingi. Vadinasi, stabdant elektronų srautą, spinduliuojamas ištisinis Rentgeno spindulių spektras („baltasis“ spektras). 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, o atsipalaiduojanti energija išspinduliuojama tam tikro bangos ilgio spinduliuote. Tuomet Rentgeno spindulių spektre stebimos atskiros intensyvios charakteringųjų spindulių linijos (15 pav.).



15 pav. Rentgeno spinduliuotės spektrai.

Šaltinis: Karenauskaitė V., Bagdonas S. ir kiti. *Biomedicinos fizika kolegijų studentams*. Vilnius, 2002.

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, gautas Rentgeno

spindulių linijinis spektras yra būdingas konkrečiai anodo medžiagai, todėl šie spektrai 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.

Galima išskirti du Rentgeno spinduliuotės spektrų tipus:

- Ištisinį spektrą (kuris atsiranda dėl elektronų stabdymo ir nepriklauso nuo anodo medžiagos);
- Linijinį spektrą – charakteringąjį – (kuris atsiranda, kai elektronai iš anodo medžiagos atomų vidinių sluoksnių išplėšia elektronus, ir į jų vietą peršoka elektronai iš aukštesnių sluoksnių). Paprastai trumpabangė Rentgeno spinduliuotė vadinama kietąja, o ilgabangė – minkštąja.

Kiekviename spektre trumpiausia stabdančioji spinduliuotė atsiranda tada, kai visa elektronų energija virsta Rentgeno fotonų energija:

$$\text{---} \quad (5)$$

$$\text{---} \quad (6)$$

$$\text{---} \quad (7)$$

Kaip matyti iš paskutiniosios lygybės, didėjant įtampai Rentgeno vamzdyje, keičiasi spinduliuotės spektrinė sudėtis: bangos ilgis trumpėja ir didėja jos skvarbumas.

Rentgeno spinduliuotės srautas randamas taip:

$$(8)$$

čia I – katodo kaitinimo srovės stipris, Z – antikatodo medžiagos atominis skaičius (atomų eilės numeris periodinėje elementų sistemoje); $k = 10^{-9} \text{ V}^{-1}$.

Kiekybinį ryšį tarp charakteringųjų Rentgeno spindulių spektro linijos dažnio ν ir elemento atominio skaičiaus Z nustatė H. Mozlis:

$$\text{---} \quad (9)$$

čia A ir B – konstantos. Ši lygybė vadinama Mozlio dėsniumi.

Mozlio dėsnis turėjo didelę reikšmę nustatant branduolių krūvius, nes, išmatavus atitinkamų linijų dažnius ν , buvo galima apskaičiuoti elemento atominius skaičius Z , taigi ir

branduolių krūvius. Šis dėsnis rodo, kad atomų cheminės savybės priklauso ne nuo jų atominės masės, o nuo elemento eilės numerio, t. y. nuo branduolio krūvio [6].

4. Vakansijų generavimas minkštaisiais Rentgeno spinduliais

Radiaciniais defektais vadinami daugiau ar mažiau pastovūs kristalo pažeidimai, atsirandantys veikiant korpuskuline arba elektromagnetine spinduliuote.

Esant bet kokiam defektų atsiradimo mechanizmui kristaluose, defektų atsiradimo metu, susidaro Frenkelio poros. Paprastai egzistuoja energetinis barjeras, trukdantis vakansijos ir tarpmazginio atomo anihiliacijai, bet jis pakankamai mažas. Kita vertus, abi Frenkelio poros komponentės, arba viena iš jų yra labai judrios, todėl judėdamos išsiskiria. Galiausiai sąveikaujant su priemaišomis, kitais struktūriniais defektais, formuojasi patvarios struktūros, kurios ir nusako radiacinį kristalo pažeidimą.

Galimi du radiacinių defektų generacijos mechanizmai:

- smūginis mechanizmas (įvykus tiesioginiam greitos dalelės susidūrimui su kristalo gardelės atomu);
- elektroninės kristalo sistemos sužadimas.

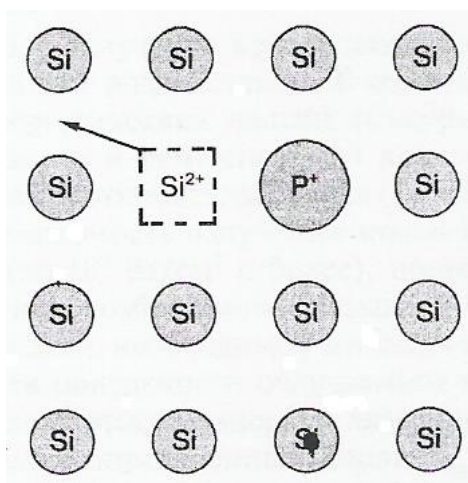
Pirmasis atvejis būdingas tik toms dalelėms, kurios turi didelį judesio kiekį: elektronams, jonams, neutronams. Elektromagnetinė spinduliuotė (γ spinduliai ir Rentgeno spinduliai) negali išmušti atomų iš gardelės mazgų tiesioginio susidūrimo metu. Tačiau elektromagnetinės spinduliuotės kvantai gali perduoti dalį savo energijos gardelės atomo elektronams branduolinio fotoefekto metu ir tokiu būdu sąlygoti radiacinių defektų atsiradimą. Nes vidiniuose Si atomo sluoksniuose K, L ir M Rentgeno spinduliuotės sąlygotas fotoefektas sukuria 2 – 3 skylutes (Ože efektas). Paviršiuje vieno atomo jungtis nedalyvauja ryšyje. Ože efektas, paviršiniuose atomuose sudaro sąlygas nutrūkti dar 2 – 3 ryšiams, nes skylutės yra užpildomos valentiniais elektronais. Taip susidaro galimybė nutrūkti tokiam ryšių skaičiui, kuris yra būtinas vakansijai susidaryti.

Norint sužadinti atomą iki slenkstinės energijos, visų pirma reikia sužadinti kristalo elektronų posistemę. Taip paveiktos sistemos grafiko $U(Q)$ konfigūracinės kreivės pasikeičia. Galiausiai energetinis barjeras sumažėja iki tiek, kad atomas gali pereiti iš mazgo į tarpmazgį arba metastabilią padėtį.

Iš bendrų samprotavimų 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 (paveikiant greitaisiais elektronais, Rentgeno spinduliais). Elektroninio sužadinimo gyvavimo periodas τ_{es} turi būti didesnis nei laikas, reikalingas atomą perkelti iš gardelės mazgo į tarpmazgį τ_{pb} . Pastariesiems būdingi periodiniai svyravimai, artimi šiluminiam kristalo svyravimams ($\sim 10^{-13}$ s). Galiausiai būtina, kad energija E_{es} perduodama atomui būtų pakankama, siekiant kuo didesnės tikimybės atomui ištrūkti iš mazgo, tai yra $E_{es} \sim E_a$. 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;
- elektroninių svyravimų nestabilumu pasižymintys mechanizmai.

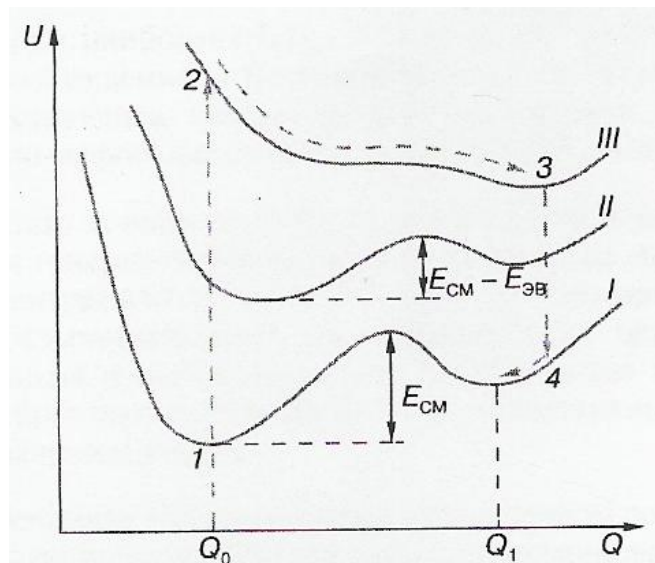
Elektrostatiniai defektų susidarymo mechanizmai realizuojami, kai tarpusavio ryšio energija elektriškai įkrautų ir sužadintų kartu su kitais dipoliais akivaizdžiai viršija kitas kristalo sąveikos energijas. Šitokią mechanizmo veikimo schemą lengva suprasti nagrinėjant kovalentinį kristalą, silicij. (16 pav.).



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

Šaltinis: Каушаров П. К. Образование точечных дефектов в полупроводниковых кристаллах. Москва, 1999.

Po dvigubos anijono jonizacijos paveikslėlio centre susidaro tokia situacija, kad šis jonas pasirodo apsupamas šešių tokio pat ženklo jonų. Veikiamas kuloninių stūmos jėgų anijonas yra išstumiamas iš mazgo į gardelę ir dėl to formuojasi Frenkelio pora. Analogiška situacija susidaro kovalentiniame kristale daug kartų jonizuojant gardelės atomą, esantį arti priemaišinio, teigiamai įelektrinto atomo. Būtina žinoti, kad norint patenkinti sąlygą $\tau_{es} > \tau_{pb}$, reikalinga daugkartinė atomo vidinių lygmenų jonizacija, nes atomo gyvavimo trukmė su dviem pašalintais valentiniais elektronais labai maža: $\sim 10^{-16} \text{ s} \ll \tau_{pb}$. Nagrinėjamą mechanizmą galima pailiustruoti tokia pat energetine konfigūracine diagrama (17 pav.).



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

Šaltinis: Кашикарров П. К. Образование точечных дефектов в полупроводниковых кристаллах. Москва, 1999.

Veikiant atomą dviguba jonizacija (procesas 1 – 2), konfigūracija apibūdinama III kreive, o mūsų atomo perėjimas į tarpmazgį be barjero vyksta (procesas 2 – 3). Paskui panaikinus elektroninį sužadimą (procesas 3 – 4), atominė konfigūracija pereina į defektinę būseną. Defektų susidarymo greitis veda prie galutinių skaičiavimų:

$$\text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad , \quad (10)$$

E_{pb} ir pereiti į būseną iš koordinatės Q_1 gali būti bendra atominėi konfigūracijai pasitelkiant šiluminės fliuktuacijas. Esant $E_{pb} - E_{es} \leq 0$ procesas vyksta nepriklausomai nuo temperatūros. Skaičiavimai, skirti panašioms į deimantus puslaidininkiams, veda prie santykinai greitos defektų generacijos:

$$\text{---} \quad \text{---} \quad (11)$$

kur R – nepastovios būsenos krūvininkų rekombinacijos sparta. Elektroninių virpesių mechanizmas turi didžiausią įtaką sužadinant puslaidininkų elektroninę posistemę [7].

4.1. Rentgeno spinduliais sužadintų vakansijų difuzijos koeficientas silicio monokristale

Nors silicio kristalai paskutiniame dešimtmetyje yra labai kruopščiai ištyrinėti, bet dar yra neišspręstų klausimų. Pavyzdžiui, silicyje generuotų vakansijų judėjimas dar diskutuojamas ir tiriamas. Iki šiol vakansijų difuzija sužadintuose Si monokristaluose, veikiant Rentgeno spinduliams nebuvo iširta.

Donorų ir akceptorų sritys didina vakansijų savitąjį elektrinį laidumą sužadintame Si monokristale. Matuojant Si kristalo laidumo laiko priklausomybę apšvitinus Rentgeno spinduliais, galima surasti vakansijų difuzijos koeficientą kambario temperatūroje. Todėl išmatuojamas prisotinimo vakansijomis laikas lygus laidumo išotinio laiku, tolygiai pasiskirsčius vakansijoms visame tūryje. Šis metodas yra perspektyvus, kadangi vakansijų judėjimas yra dominuojantis mechanizmas atomų difuzijoje ir kristalų dislokacijų augime. Žemose temperatūrose difuzijos koeficientas paprastai gali būti gautas iš elektroninio rezonanso parametrų ar infraraudonojo sugėrimo eksperimentų. Įvertinant difuzijos koeficientą aukštoje temperatūroje, pavyzdys turi būti atkaitintas iki matavimo temperatūros. Atkaitinimo metodas netikslus, nes tai neleidžia nustatyti difuzijos koeficiento, kai proporcingumo koeficientas tarp laidumo ir vakansijų koncentracijos yra nežinomas. Gauti rezultatai gali būti naudojami, kuriant detektorius ir Rentgeno dozimetrus.

Panaudojant Rentgeno spindulius vakansijų generavimui Si kristalų paviršiuje yra nuodijami minkštieji Rentgeno spinduliai. Vakansijos Si elgiasi kaip vieną kart neigiami ir dukart neigiami akceptoriai, kurie padidina p – tipo mėginio laidumą [8]. Aukštos varžos $667 \Omega \text{ cm}$ p – Si (legiruotu su boru) mėginiai, kurių išmatavimai $3,33 \times 3,06 \times 3,09 \text{ mm}^3$ buvo apšvitinti

Rentgeno spinduliais. Dėl Ože efekto atsiradusios neigiamos vakansijos migracijos metu kristale elgiasi kaip akceptorai ir padidina elektrinį laidumą. Galima išreikšti maksimalaus vakansijų įsiskverbimo gylį dydžiu x_0 difuzijos kristale prisotinimo laiku t_0

$$\text{---} \quad (12)$$

kur vakansijų difuzijos koeficientas D_v gali būti išreikštas kita formule:

$$\text{---} \quad (13)$$

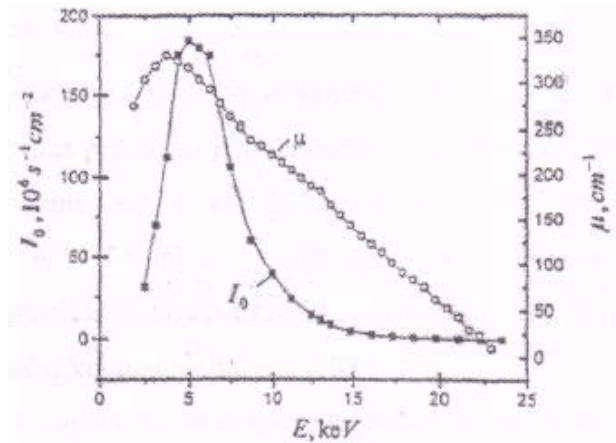
Čia D_0 – eksponentinis koeficientas ir ΔH_m yra vakansijų judėjimo entalpija. Tam, kad būtų generuotos neigiamos, teigiamos ir neutralios vakansijos sužadintame kristale, buvo panaudota Rentgeno spinduliuotė, gaunama naudojant lempą su vario anodu. Rentgeno spindulių intensyvumo eksponentinis mažėjimas sužadintame Si:

$$\text{---} \quad (14)$$

Absorbcijos koeficientas $\mu(E)$ buvo nustatytas išmatuojant Rentgeno spindulių intensyvumą prieš bandymą pavyzdyje $I_0(E)$ ir po jo $I_B(E)$. Absorbcijos koeficientas išmatuotas, naudojant liuminescencinį skaitiklį ir difraktometrą DRON 2.0. Gauta Rentgeno spindulių absorbcijos koeficiento priklausomybė nuo energijos (19 pav.). Gauti rezultatai gali būti patikrinti naudojant teorines formules Rentgeno absorbcijos koeficientui μ :

$$\text{---} \quad (15)$$

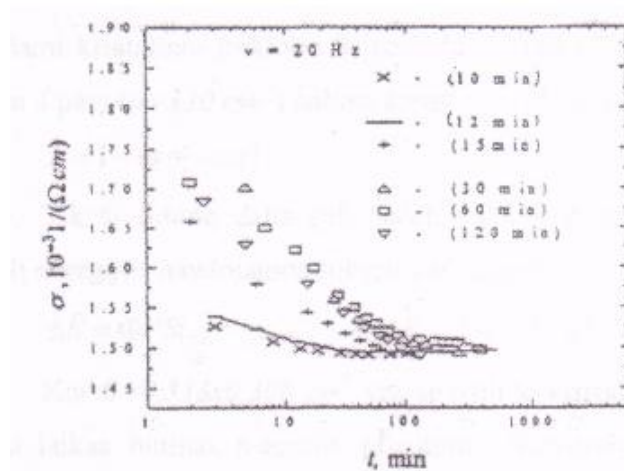
kur C yra konstanta, $k = 4$, $n = 3,5$ Rentgeno spindulių ir n_0 yra Si atomo koncentracija. Naudojant Al gaunamas $C = 1,728 \cdot 10^{-81} \text{ m}^2 \text{ J}^{3,5}$. Tada sužadinto Si atomų K_α fotonai Cu ($E = 8,986 \text{ keV}$), gautas laidumas $\sigma_f = 8,81 \cdot 10^{-25} \text{ m}^2$ fotoelektrinio elektronų išspinduliavimo iš elektronų absorbcijos koeficientas $\mu = 439 \text{ cm}^{-1}$ Si kristale. Iš 19 pav. autoriaus gautas $\mu = 12,8 \text{ cm}^{-1}$ Rentgeno fotonams su 22 keV energija. Rezultatai parodo, kad tikrai fotonai su maksimalia energija (25 keV) gali palikti sluoksnį, storiu $d = 3,09 \text{ mm}$.



19 pav. Rentgeno spindulių ir absorbcijos koeficiento priklausomybė nuo bombarduojančių fotonų energijos.

Šaltinis: Janavičius A. J., Banys J., Purlys R., Balakauskas S. *The diffusion coefficient of vacancies excited by X – rays in monocrystalline Si.* // *Lithuanian Journal of Physics*, Vol. 42, No. 5, pp. 337 – 340 (2002).

19 pav. matome, kad Rentgeno lempos, kuri buvo panaudota matuojant anodo įtampą (20 – 25 kV), daugelis fotonų turi energiją mažesnę nei 10 keV ir dauguma fotonų yra absorbuojami paviršiuje. Jie sudaro cheminius ryšius Si pavyzdžio paviršiuje ir generuoja vakansijas. Rentgeno spinduliai negali sukurti tarpmazginių atomų dėl tiesioginių susidūrimų su atomų branduoliais, nes atomų dislokacijos energija 15,8 eV yra pakankamai aukšta.



20 pav. Laidumo priklausomybė nuo laiko.

Šaltinis: Janavičius A. J., Banys J., Purlys R., Balakauskas S. *The diffusion coefficient of vacancies excited by X – rays in monocrystalline Si.* // *Lithuanian Journal of Physics*, Vol. 42, No. 5, pp. 337 – 340 (2002).

Indukuotas laidumas σ_w buvo apskaičiuotas Hewlett – Packard (4284 A 20 Hz – 1 MHz) dažnio diapazonu nuo 20 Hz iki 1 MHz. Laidumas buvo apskaičiuotas iš formulės:

$$(16)$$

Gauta išmatuoto pavyzdžio laidumo priklausomybė nuo laiko po skirtingų apšvitinimo periodų. Šios kreivės naudojamos apskaičiuoti pavyzdžių su vakansijomis prisotinimo laikui. Taip pat šios kreivės parodo, kad pavyzdys prisotintas vieno tipo vakansijomis. Kečiant apšvitinimo periodus buvo rastas pavyzdžių prisotinimo laikas su atskirai sužadintomis aukšto judrumo vakansijomis. Prisotinimo laikas $t_s = 15$ min negali būti matuojamas dideliu tikslumu, ir šis faktas mažina visų matavimų tikslumą.

Pirmiausia reikia apskaičiuoti vakansijų skaičių, kuris buvo sukurtas pavyzdžio paviršiuje. Si legiruoto boru pavyzdžio laidumas gali būti išreikštas kaip:

$$(17)$$

čia p – skylių skaičius cm^3 ir μ_p – jų judrumas. Duotoje temperatūroje judrumas priklauso nuo skylių koncentracijos. Pasinaudojant σ_1 ir p_1 įvertiname duotas ($\sigma_1 = 0,01 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, boro akceptorų koncentracija $p_1 = 3,1 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-3}$, $T = 300 \text{K}$, ir išmatuotas laidumas $\sigma_2 = 1,5 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, apšvitintų vakansijų migracijos iš vidaus į kristalų paviršių (20 pav.), iš (17) rezultatų gauta sekanti pradinė skylių koncentracija $p_2 = 4,65 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-3}$.

Po apšvitinimo mėginio laidumas pakyla iki $1,71 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, nes skylių koncentracija sukurta boro p_2 atomų ir vienos sužadintos vakansijos Δp_2 padidėja iki $p_2 + \Delta p_2 = 5,33 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-3}$. Galima panaudoti vakansijų plokštumą $\Delta p_2 = 0,682 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-3}$ ir nustatyti vakansijų skaičių įvestų į tūrį apšvitinimo metu:

$$(18)$$

Parinkta Rentgeno lempos anodinė įtampa 22 kV, anodinė srovė – 15 μA . Krentančios radiacijos energetinis srautas išmatuotas liuminescenciniu skaitliuku, $\Phi = 1,22 \cdot 10^{15} \text{eV cm}^{-2} \text{s}^{-1}$. Vakansijos gali būti sukurtos fotonų sugertų paviršiaus sluoksnyje. Atomų koncentracija Si periodu $\alpha = 0,543 \cdot 10^{-8} \text{cm}$ ir absorbcijos koeficientu (19 pav.) $\mu = 330 \text{cm}^{-1}$, galime surasti absorbuotų fotonų dalį sluoksnio paviršiuje:

$$(19)$$

Tik ši fotonų dalis gali inicijuoti vakansijų generaciją. Dabar galima apytiksliai įvertinti dalį energijos, kuri naudojama sukurti vakansijas:

$$(20)$$

Kur $S = 0,333 \times 0,306 \text{ cm}^2$ yra apšvitinto kristalo plotas, $t_1 = 900 \text{ s}$ yra minimalus apšvitinimo laikas, būtinas mėginiui prisotinti vakansijomis. Iš (18) ir (20) rezultatų galima rasti vienos neigiamos sužadintos vakansijos susiformavimo energiją — . Vakansijų skaičius įvestas į mėginį gali būti išreikštas pasinaudojant formule, atomų priemaišų skaičius įvestų difuzijos procese:

$$(21)$$

Čia $N_{VS} = 2,51 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-1}$ yra vakansijų koncentracija apšvitinto paviršiaus pusėje, tiksliai pusė iš jų judės į didesnę pavyzdžio tūrį. N_{S1} yra priemaišų atomų arba vakansijų koncentracija kristalo paviršiuje priemaišų difuzijos vienmatis modelis, taikomas nuolatiniam šaltiniui. Pavyzdžio kraštinės ilgis yra $x_{01} = 0,309 \text{ cm}$, kuris lygus maksimaliam vakansijų išsiskverbimo gyliui. D_V yra vakansijų difuzijos koeficientas ir t_1 yra pavyzdėlio prisotinimo vakansijomis laikas. Iš 23 pav. matome, kad apšvitinimo laikas reikalingas, pavyzdžiui prisotinti su neigiamomis vakansijomis yra lygus $t_1 = 15 \text{ min}$. Besitęsiant šiam minimaliam apšvitinimo laikui, maksimalus neigiamai sužadintų vakansijų skaičius įvedamas į pavyzdį. Gaunamas vakansijų difuzijos koeficientas Si kambario temperatūroje (apie 290 K).

$$(22)$$

Iš 19 pav. galime matyti, kad visuose eksperimentuose su periodiniu apšvitinimu ilgiau nei 15 min, gautas pavyzdžio prisotinimas vakansijomis ir, kad vakansijos paliko pavyzdį per tą patį laiką $t = 87 \text{ min}$. Šis procesas gali būti aprašytas perskirstymu arba antros eilės difuzijos stadija. Antros eilės difuzijai turime santykį tarp pastovios koncentracijos N_{S1} apšvitintame paviršiuje per pirmos difuzijos stadijos laiką t_1 (kol pavyzdys prisotinamas vakansijomis) ir vakansijų koncentracija N_{S2} , po difuzijos antros stadijos laiko t , kol vakansijos palieka šį pavyzdį:

$$(23)$$

Turime atkreipti dėmesį

$$(24)$$

iš (19) ir (21) rezultatų gautas laikas $t = 166 \text{ min}$, būtinas vakansijų pašalinimui iš pavyzdėlio. Palygindami šį rezultatą su 20 pav. ir 2 lentele, galime matyti, kad šis rezultatas sutampa su eksperimentiniu.

2 lentelė

Elektrinis laidumas $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ Si pavyzdyje apšvitinus Rentgeno spinduliais radiacijos periodais $t_1 = 12 \text{ min}$, $t_2 = 15 \text{ min}$ ir $t_3 = 60 \text{ min}$.

| t, min | 2 | 7 | 12 | 17 | 27 | 47 | 72 | 87 | 172 |
|--|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $\sigma_1 \cdot 10^3, \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$ | 1,54 | 1,52 | 1,51 | 1,50 | 1,50 | 1,50 | 1,50 | 1,50 | 1,50 |
| $\sigma_2 \cdot 10^3, \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$ | 1,71 | 1,65 | 1,62 | 1,60 | 1,56 | 1,54 | 1,52 | 1,51 | 1,51 |
| $\sigma_3 \cdot 10^3, \Omega^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$ | 1,71 | 1,65 | 1,62 | 1,60 | 1,56 | 1,54 | 1,52 | 1,51 | 1,51 |

Šaltinis: Janavičius A. J., Banys J., Purlys R., Balakauskas S. The diffusion coefficient of vacancies excited by X – rays in monocrystalline Si. // Lithuanian Journal of Physics, Vol. 42, No. 5, pp. 337 – 340 (2002).

Pasinaudodami Si atomo žinoma koncentracija $5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ir (21) rezultatai, galime surasti vieną kartą neigiamų vakansijų reliatyvią koncentraciją $N_r = 1,35 \cdot 10^{-10}$. Tada pasinaudodami žinoma lygybe:

$$, \quad (25)$$

raštas savidifuzijos koeficientas $7,15 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$ Si kristale kambario temperatūroje.

Gautas rezultatas gali būti palygintas su difuzijos koeficientu $D_{1V} = 1,48 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$ ir $D_{2V} = 7,28 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ išdėstytame temperatūroms $T_1 = 160 \text{ K}$ ir $T_2 = 1685 \text{ K}$. Rezultatas $D_v = 5,30 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ sužadintoms vakansijoms gautas su dideliu tikslumu ir yra arti D_2 rezultatao. Šis rezultatas parodo galimybę sukurti aukštos kokybės mikroelektronikos įrenginius kambario temperatūroje, naudojant difuzijos sužadinimą Rentgeno spinduliuote. Pasiūlytas metodas, anksčiau nebuvo naudotas, difuzijos sužadintų vakansijų nustatymui. Migracijos entalpijos dydis ΔH_m yra toks pat kaip ir energija reikalinga išardyti tarpatominius ryšius Si paviršiuje. Ši energija yra nuo 1 iki 1,5 eV ir pavieniui sužadintų vakansijų atveju, tai yra apytikriai tolygu vakansijos susidarymo energijai 0,946 eV. Naudojant šį metodą skirtingoms temperatūroms, vakansijos migracijos entalpija ir eksponentinis faktorius gali būti išgautas su pakankamu tikslumu. Jis turi praktinį svarbumą, nes vakansijos migracija paprastai yra dominuojantis mechanizmas difuzijos atome ir kristalų augime [8], [9].

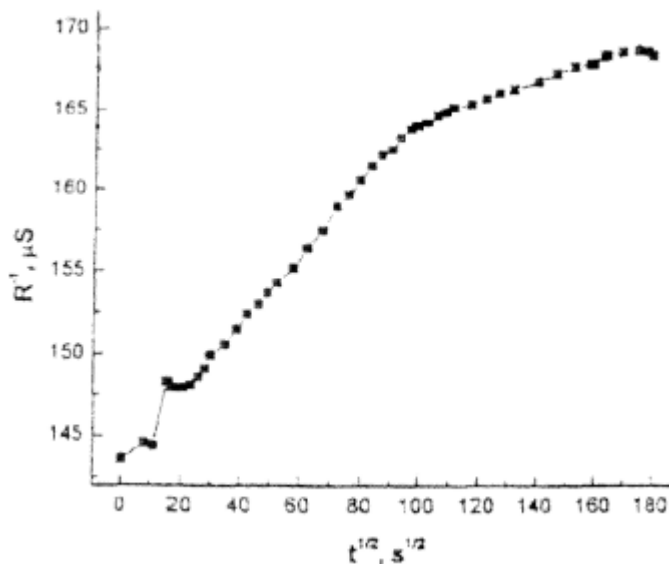
4.2. Silicio kristalų elektrinis laidumas ir vakansijų difuzijos koeficientas

Pasinaudodami elektrinio laidumo priklausomybe nuo laiko ir Holo judrumo dydžių rezultatais galime nagrinėti vakansijų judrumą. Vakansijų, kaip donorų, arba akceptorų taikymo

sritys yra reikšmingos keičiant puslaidininkių elektrinį laidumą. Šie efektai svarbūs kieto kūno fizikai ir Rentgeno spindulių detektorių degradacijai, žemų temperatūrų difuzijai ir technologiniam kristalų auginimui.

Remiamasi R. Purlio, A. J. Janavičiaus ir kitų mokslininkų atliktais bandymais su p – Si generuotomis neigiamomis vakansijomis (Holo judrumas $\mu_{0H} = 237 \pm 5 \text{ cm}^2/(\text{Vs})$, $p_0 = 4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, $\sigma_0 = 1,51 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$).

Labiausiai absorbuojanti Rentgeno fotonų sritis su energija $E = 8,986 \text{ keV}$ turi pakankamai energijos, kad sukurtų fotoelektronus ir valentinius elektronus vidiniuose K, L, M Si atomo sluoksniuose – Ože efektas. Jie ardo cheminius ryšius Si mėginėlio paviršiniuose atomuose ir taip susidaro galimybė nutrūkti tokiam ryšių skaičiui, kuris yra būtinas vakansijai susidaryti. Tarpiniai atomai negali būti sukurti Rentgeno spindulių, nes Si atomų išlaisvinimo energija 15,8 keV pakankamai aukšta.



21 pav. Laidumo priklausomybė nuo švitinimo laiko.

Šaltinis: Purlys R., Janavičius A. J., Mekys A., Balakauskas S. ir Storasta J. Electrical conductivity of Si and GaAs monocrystals excited by soft X – rays. // Lithuanian Journal of Physics, 2001, 41, No. 4 – 6, 376 – 380.

Iš eksperimentiškai išmatuotos savitojo laidumo $1/R$ (21 pav.) priklausomybės nuo laiko galime gauti mėginio su vakansijomis prisotinimo taiką t_s . Pavyzdys prisotintas su vienąkart neigiamomis dviejų tipų vakansijomis su dideliu judrumu. Išnagrinėjant savitojo laidumo priklausomybę $\overline{\quad}$, parodyta 21 pav., kur t_s yra švitinimo laikas (prisotinto savitojo laidumo vertė privalo būti proporcinga prisotintų vakansijų skverbimosi gyliui), mes matome, kad

prisotinimo laikas $t_s = 200$ min gali būti gautas iš mėginio su vienąkart neigiamomis vakansijomis su dideliu judrumu ir prisotinimo laiku $t_{s2} = 415$ min, su lėtomis dukart neigiamomis vakansijomis.

Pirmiausia apskaičiuojamas vakansijų, sukurtų mėginio paviršiuje, skaičius. Boro vakansijų laidumas išreikštas taip:

$$\sigma_1 = \mu_p p_1 \quad (26)$$

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

$$\frac{\sigma_1}{\sigma_2} = \frac{p_1}{p_2} \quad (27)$$

Tada pasinaudojus žinomu laidumu (Janavičius A. J., 2001) $\sigma_1 = 0,01 \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ ir boro (akceptorijų) koncentracija $p_1 = 3,1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, temperatūra $T = 300 \text{ K}$, taip pat laidumu $1/R$ pateiktą 24 pav., iš nešvitinto Si mėginio formulių (26) ir (27) randama skylių koncentracija $p_2 = 4,49 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

Po apšvitinimo laiko $t_{s1} = 200$ min, Si mėginys prisotintas vienąkart neigiamomis vakansijomis ir įvestomis dukart neigiamomis vakansijomis. Tada mėginio laidumas padidėja iki $1/R = 163 \mu\text{S}$. Tarkime, kad savitojo laidumo padidėjimas proporcingas papildomų skylių koncentracijai, sukurtai vienąkart neigiamomis Δp^s (po apšvitinimo laiko $t_{s1} = 200$ min) ir dukart neigiamomis Δp_{--} vakansijomis, turime: $p_2 + \Delta p^s + \Delta p_{--} = 5,15 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Galime panaudoti skylių tankumą $\Delta p^s + \Delta p_{--} = 0,66 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, įvertinant įvestų kiekį, vienąkart ir dukart neigiamų vakansijų mėginio tūryje V , po pilno prisotinimo ($t_{s2} = 415$ min) iš sekančios lygybės:

$$\Delta \sigma^s = \mu_p (\Delta p^s + \Delta p_{--}) \quad (28)$$

kur $\Delta \sigma^s = 0,25 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ – savitojo laidumo padidėjimas po pilno prisotinimo neigiamomis vakansijomis Si mėginio ir $\Delta \sigma^s = 0,2 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ – savitojo laidumo padidėjimas po prisotinimo vienąkart neigiamomis vakansijomis. Tada iš paskutinio išreiškimo turime:

$$\Delta p^s + \Delta p_{--} = 0,66 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (29)$$

$$p_2 + \Delta p^s + \Delta p_{--} = 5,15 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (30)$$

Iš formulės (27) rezultatų randamas:

$$\frac{\sigma_1}{\sigma_2} = \frac{p_1}{p_2}$$

ir po išspręstos sistemos (23), (24) gaunamas:

$$\Delta p^s = 0,286 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}, \quad \Delta p_{--} = 0,539 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad (31)$$

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

$$\dots, \quad (32)$$

$$- \dots \quad (33)$$

Sukurtų ir įvestų į mėginį vakansijų skaičius, gali būti išreikštas naudojant netiesinę difuzijos teoriją:

,

kur N_{vs} – vakansijų koncentracija, apšvitintos pusės paviršius (N_{s1} yra priemaišos atomų koncentracija paviršiuje dėl priemaišų difuzijos pastovaus šaltinio, $x_{01} = 0,309 \text{ cm}$ – vakansijų prasiskverbimo gylis). Paskutinėje lygybėje turime D_v , difuzijos vakansijų koeficientas ir t_1 prisotinto vakansijomis mėginio laikas. Iš 21 pav. ir skaičiavimo rezultatų mes galime manyti, kad švitinimo laikas prisotinto mėginio su atskirai sužadintomis vakansijomis įgyja $t_1 = 200 \text{ min}$ ir su dvigubai sužadintomis $t_2 = 415 \text{ min}$. Per šį laiką maksimalus pavieniui sužadintų vakansijų kiekis įvestas mėginyje. Šiuo metu iš formulės galima gauti difuzijos koeficientus iš pavienių ir dvigubai sužadintų vakansijų Si kambario temperatūroje (290 K):

$$D_- = 3,05 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}, \quad D_{--} = 1,47 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}. \quad (34)$$

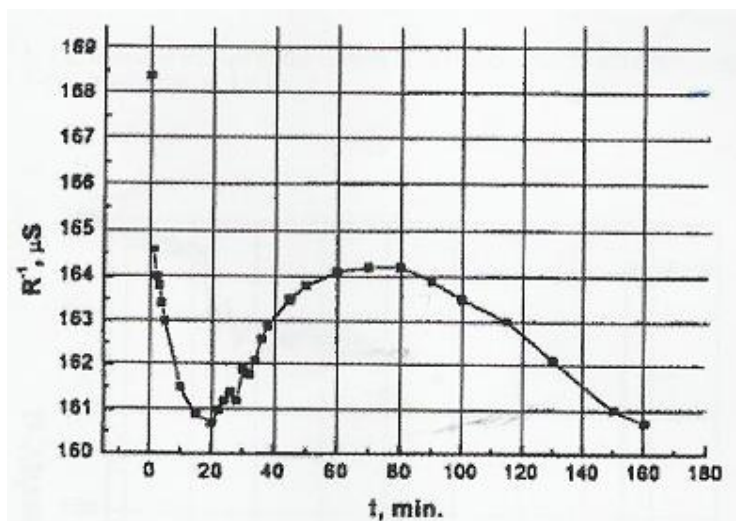
Galime palyginti rezultatus su difuzijos vakansijų koeficiento išraiška silicyje, gautų iš žemų ir aukštų temperatūrų eksperimentų:

$$\text{---} \quad \text{---} \quad \dots \quad (35)$$

Iš šios formulės kambario temperatūroje $T = 300 \text{ K}$ gauname:

$$D_v = 4,4 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}, \quad (36)$$

Iš to galime daryti labai svarbią išvadą, kad difuzijos sąlygos apšvitintame Si pavyzdelyje iš esmės skiriasi. Mes galime teigti, kad apšvitintas pavyzdėlis yra sužadintoje būsenoje su skirtingomis fizikinėmis savybėmis. Tokia pat išvada buvo gauta Si pavyzdžiui, po apspinduliavimo, atliekant elektrinio laidumo ir Holo matavimus. Elektrinio laidumo mažėjimas po Si mėginio švitinimo pavaizduotas 22 pav.



22 pav. Laidumo priklausomybė R^{-1} nuo laiko t , po švitinimo išjungimo kai $t = 0$.

Šaltinis: Purlys R., Janavičius A. J., Mekys A., Balakauskas S. ir Storasta J. *Electrical conductivity of Si and GaAs monocrystals excited by soft X – rays. // Lithuanian Journal of Physics, 2001, 41, No. 4 – 6, 376 – 380.*

Čia matomas greitas fotolaidumo mažėjimas ir ta pati laidumo priklausomybė nuo metastabilių ir bistabilių defektų silicio kristale.

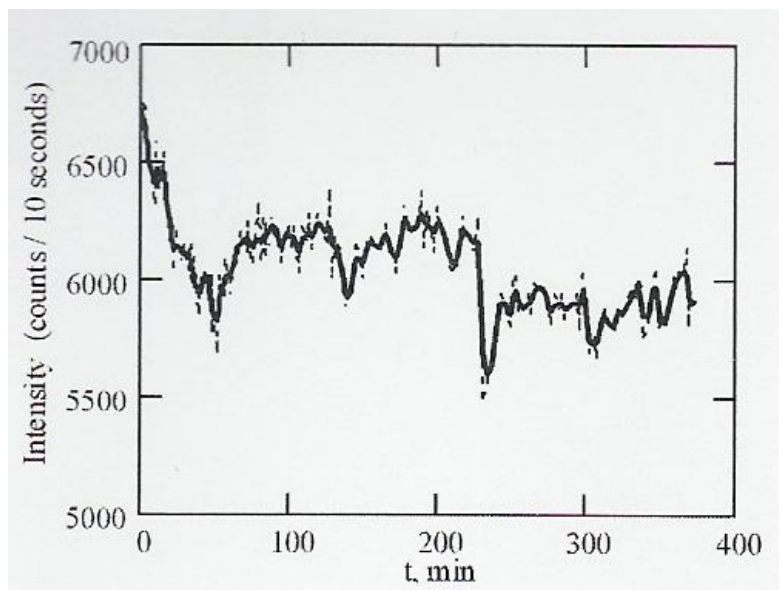
Galima teigti, kad Rentgeno spinduliuotės taikymas yra naudingas metodas vakansijų generavimui silicyje. Teigiamai ir neigiamai įkrautos vakansijos elgiasi kaip donorai ir akceptorai, bei padidina kristalo elektrinį laidumą. Buvo išmatuotas fotosrovės prisotinimas ir švitinimo laikas. Eksperimentiniai duomenys rodo, kad po spinduliavimo laiko $t_{sl} = 200$ min Si pavyzdys yra prisotintas vieną kartą įkrautų vakansijų ir įvestų dvigubai įkrautų vakansijų. Galima teigti, kad elektriniai procesai yra dominuojantys Rentgeno spinduliuote švitinant silicio kristalą [10].

4.3. Relaksacijos procesai, inicijuojami minkštaisiais Rentgeno spinduliais, kristaliniame silicyje

Šiame eksperimente buvo naudojamas aukšto pralaidumo 667Ω silicio kristalo pavyzdėlis su boro priemaišomis. Jeigu silicis yra su boro priemaišomis, trys elektronai formuoja kovalentinius ryšius su kaimyniniais silicio atomais, paliekant ketvirtą ryšį nesudarytą. Silicio kristalo švitinimas minkštaisiais Rentgeno spinduliais sukelia Ože procesus, kurie generuoja labai

greitas vakansijas ir suardo gardelės ryšius. Visi sutraukti ryšiai keičia gardelės energiją ir didina gardelės distorsijas. Nešėjų tankumo priklausomybė Ože rekombinacijoje, nešėjų perėjimas į įkrautas vakansijas ir fononų rekombinacija daro naudingą šių procesų ištyrimą. Greita Ože rekombinacija ir laisvų nešėjų absorbcija apsaugo optinius perėjimus silicio kristale ir išaugina relaksacijos procesų galimybę. Šie relaksaciniai efektai taip pat gali būti generuoti skirtingais vakansijų išsklaidymais skirtingose įkrovimo būsenose. Įkrautų vakansijų difuzijai su silicio pavyzdžiais su B ir P priemaišomis Fermi lygmuo E_F turi priklausyti nuo laiko. Svarbu, kad įkrautų defektų koncentracija taip pat keičiasi su E_F .

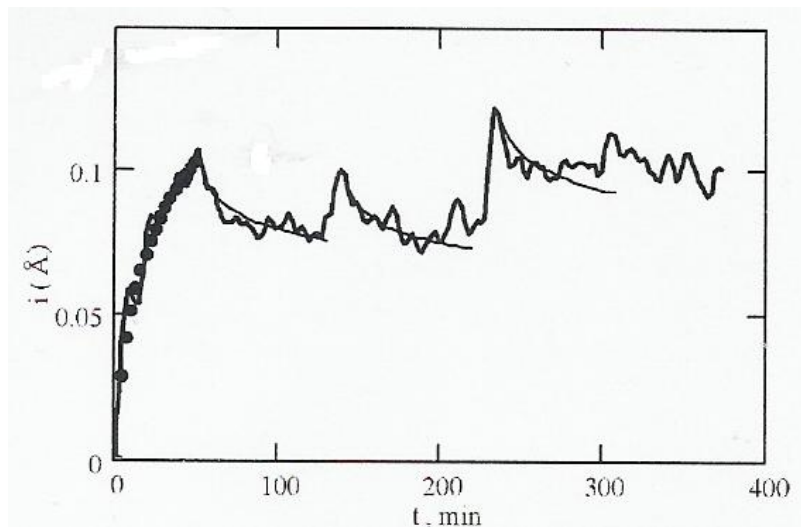
Eksperimentiniai Rentgeno spindulių intensyvumo matavimai buvo atlikti su difraktometru DRON – 2.0, sumuojant fotonų skaičių 10-ties sekundžių intervale su vienos minutės laikotarpiu, nustatytu kampu $\theta = 47,48^\circ$. Eksperimentas buvo atliekamas naudojant vario anodą su Rentgeno spindulių charakterine spektrine linija $K_{\alpha 1}$, bangos ilgis $\lambda = 1,5405 \text{ \AA}$, anodo įtampa 6 kV, Rentgeno vamzdžio srovė 23 mA. Matavimai buvo atliekami 290 K temperatūroje. Rezultatai matomi 23 pav.



23 pav. Intensyvumo eksperimentinė priklausomybė (fotonų skaičius registruojamas kas 10 s su difraktometru DRON – 2.0 fiksuotam difrakcijos kampui $\theta=47,48^\circ$, atspindžiui nuo Si kristalo plokštumos (1 1 1)) nuo laiko t (min).

Šaltinis: Janavičius A. J., Starasta J., Purlys R., Mekys A., Balakauskas S. ir Norgėla Ž. Crystal lattice and carriers Hall mobility relaxation processes in Si crystal irradiated by soft X-rays. // Acta Physica Polonica A, Vol. 112 (2007), No. 1.

24 pav. nurodo kvadratinę šaknį standartinio kvadratinio nuokrypio silicio atomų nuo jų pradinės padėties. Plonos linijos žymi i interpoliacijas ir nusako periodo pakitimus ($\alpha = 0,8$) iš metastabilių būsenų, esant vienodiems laiko tarpams $t_0 = 80$ min. Interpoliacijos taškuota linija yra proporcinga sužadavimo funkcijai, kai sužadavimo parametras $\alpha = 1,65$ ir periodas $t_0 = 50$ min.



24 pav. Vidutinė kvadratinė atomų nuokrypio nuo pusiausvyros padėties priklausomybė nuo laiko t (min).

Šaltinis: Janavičius A. J., Storasta J., Purlys R., Mekys A., Balakauskas S. ir Norgėla Ž. *Crystal lattice and carriers Hall mobility relaxation processes in Si crystal irradiated by soft X-rays.* // *Acta Physica Polonica A*, Vol. 112 (2007), No. 1.

Virpantys šių perėjimų nariai i buvo pritaikyti formulei:

$$\frac{1}{\alpha} \frac{d^2 i}{dt^2} + \frac{1}{\alpha} \frac{di}{dt} + i = \frac{1}{\alpha} \frac{d^2 i_0}{dt^2} + \frac{1}{\alpha} \frac{di_0}{dt} + i_0, \quad (37)$$

laiko priklausomybei nuo silicio gardelės prisotinimo metastabiliomis būsenomis, naudojant fiksuotą α parametro reikšmę 0,8. Šios osciliacijos su sužadavimo parametru α rodo, kad silicio kristalo gardelė, apšvitinta minkštaisiais Rentgeno spinduliais elgiasi kaip dviejų lygių sistema atominiams perėjimams iš metastabilių būsenų į kaimynines metastabilias vakansijas arba grįžtamus perėjimus, sukuriant metastabilias vakansijas. Taip pat ten gali būti sukuriamos paprastos vakansijos su kaimyniniais atomais tarpmazgiuose. Visi šie procesai yra generuojami elektronų judėjimo tarp laidumo ryšių ir užkrautų vakansijų bei sužadintų atomų vibracijų metastabiliose būsenose. Svarbios sužadintų gardelių vibracijos gali būti išvestos iš to fakto, kad

silicio kristalas po švitinimo gali likti sužadintas daugybei valandų. Pradinė taškinių defektų susidarymo nuo laiko intervalo priklausomybė šiame eksperimente gali būti apibrėžta sužadavimo parametru $\alpha = 1,65$. Vienodos sužadavimo konstantos skirtingoms anodo įtampoms ir Rentgeno vamzdžio srovė parodo, kad šios konstantos priklauso tik nuo silicio kristalo savybių. Aptiktasis *i* rezonansas gali būti interpretuojamas kaip normalaus rezonansinio perėjimo modelis kartu osciluojančių atomų į metastabilias būsenas, taip pat, kaip grįžimas į vakansijas, kai švitinimas yra sukliamas 5 – 15 keV fotonų. Šie fotonai gali sukelti gardelės vibracinę energiją ir sukurti sužadintas vakansijas su Ože efektu. Atomų vibracijos sužadintose būsenose gardelėje, sukurtos Rentgeno spindulių, atlieka išorinių periodinių jėgų rolę. Kai jų dažnis sutampa su šiluminio virpėjimo dažniu, įvyksta rezonansas $\omega_r = \omega_v$, čia k – yra osciliatoriaus konstanta, c – yra slopinimo jėgų greičio priklausomybės koeficientas, m – yra osciliatoriaus masė. Maksimali kaimyninių atomų vakansijų osciliacijų amplitudė esant rezonansiniam dažniui yra lygi $\omega_r = \omega_v$. Šis rezonansas gali būti gaunamas tik esant tam tikroms anodo įtampoms. Iš to galima suprasti, kad taškinių defektų kristalinėje gardelėje osciliacijų skaičius gali būti pamatuojamas tik esant specialioms įtampos vėrtėms Rentgeno vamzdyje [11].

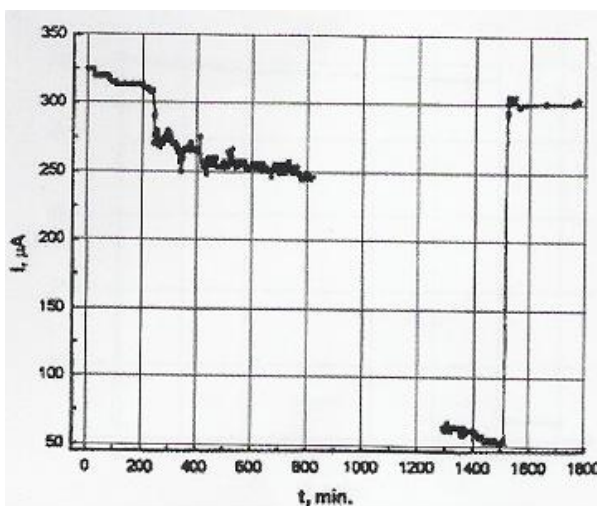
5. Gautų rezultatų analizė

Vilniaus universiteto fizikų grupė susidedanti iš dr. R. Purlio, prof. J. Storastos, dr. A. Mekio, dr. S. Balakausko, vadovaujama Šiaulių universiteto profesoriaus A. J. Janavičiaus atrado galimybę sukurti aukštos kokybės mikroelektronikos įrenginius kambario temperatūroje, naudojant difuzijos sužadimą Rentgeno spinduliuote. Pasiūlytas metodas anksčiau nebuvo naudotas difuzijos sužadintų vakansijų nustatymui. Naudojant šį metodą skirtingoms temperatūroms, vakansijos migracijos entalpija ir eksponentinis faktorius gali būti išgautas su pakankamu tikslumu. Jis turi praktinį svarbumą, nes vakansijos migracija paprastai yra dominuojantis mechanizmas difuzijos atome ir kristalų augime.

20 pav. rodo, kad silicyje, kambario temperatūroje, minkštais Rentgeno spinduliais yra generuojamos ilgai gyvuojančios vakansijos, kurios lėtai difunduoja į kristalo vidų. Vakansijos, generuotos kitais metodais, kambario temperatūroje, yra nestabilios.

Švitinant 3 mm dydžio kubelį, vakansijos buvo generuojamos to kubelio paviršiuje, nes minkšti Rentgeno spinduliai išsiskverbia panašiai iki 0,1 mm gylio. Todėl iš 20 pav. matyti, kad kubelis yra užpildomas vakansijomis per ~ 10 min, atitinkamai vakansijos galutinai išsiskirsto per ~ 100 min. Galima daryti labai svarbią išvadą, kad kambario temperatūroje buvo sugeneruotos ilgai gyvuojančios vakansijos.

Išnagrinėjus dar vieną mokslininkų eksperimentinį tyrimą, kuriame buvo stebimas greitas fotolaidumo mažėjimas ir laidumo priklausomybė nuo metastabilių ir bistabilių defektų silicio kristale, galima teigti, kad Rentgeno spinduliuotės taikymas yra naudingas metodas vakansijų generavimui silicyje. Teigiamai ir neigiamai įkrautos vakansijos elgiasi kaip donoriai ir akceptorai, bei padidina kristalo elektrinį laidumą. Buvo išmatuotas fotosrovės prisotinimas ir švitinimo laikas. Eksperimentiniai duomenys rodo, kad po spinduliuavimo laiko $t_{sl} = 200$ min Si pavyzdys yra prisotintas vieną kartą įkrautų vakansijų ir įvestų dvigubai įkrautų vakansijų. Galima teigti, kad elektriniai procesai yra dominuojantys, Rentgeno spinduliuote švitinant silicio kristalą.

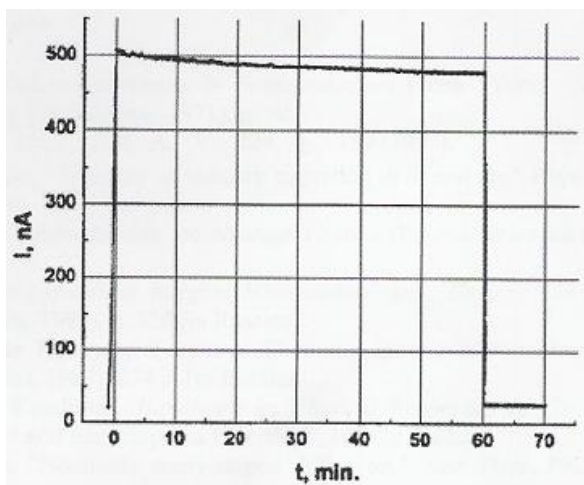


25 pav. Laikinas srovės pasikeitimas silicyje po minkštos Rentgeno spinduliuotės išjungimo.

Šaltinis: Purlys R., Janavičius A. J., Mekys A., Balakauskas S. ir Storasta J. Electrical conductivity of Si and GaAs monocrystals excited by soft X – rays. // Lithuanian Journal of Physics, 2001, 41, No. 4 – 6, 376 – 380.

Iš 25 pav. matome, kad pats silicio kristalas yra metastabilioje būsenoje, nes įvyksta staigus elektrinio laidumo atsistatymas. Atsistato kristalo laidumo juostos, kvantiniai lygmenys. Galime daryti išvadą, kad dalis defektų yra stabilūs.

Toks pat bandymas buvo atliktas ir su kitu elementu (GaAs).



26 pav. Fotosrovės ir laiko priklausomybė Si GaAs per spinduliavimą ir po spinduliavimo išjungimo.

Šaltinis: Purlys R., Janavičius A. J., Mekys A., Balakauskas S. ir Storasta J. Electrical conductivity of Si and GaAs monocrystals excited by soft X – rays. // Lithuanian Journal of Physics, 2001, 41, No. 4 – 6, 376 – 380.

26 pav. matome, kad įjungus spinduliavimą laidumas staigiai padidėja dėl fotoefkto. Ties 30 elementu Ože efektas nebesapireiškia ir vakansijos negeneruojamos. Iš to galime daryti išvadą, kad ne visuose kristaluose galimas vakansijų generavimas ir laidumo pokytis.

Naudojant minkštuosius Rentgeno spindulius ir gaunant Ože efektą, tyrimą atlikę mokslo daktarai, gavo periodinius silicio atomų perėjimus į žemesnes metastabilias būsenas su mažesnėmis distorsijomis gardelėse. Po silicio atomų pašalinimo iš gardelės į metastabilias ar labiau stabilias tarpmazgines būsenas, susiformuoja neigiamai užkrautos vakansijos, kurios gali nukeliauti palyginti tolimus atstumus. Šios vakansijos gali migruoti jei bent du ryšiai yra nutraukti ir pakanka kambario temperatūros. Keletas atomų metastabiliose būsenose, kurie yra greta sužadintų vakansijų, gali migruoti į labiau stabilias tarpmazgines būsenas, taip pakeisdami šias vakansijas į nesužadintas. Vyraujanti šių procesų kryptis priklauso nuo sąveikos su gardelės vibracijomis ir elektronų perėjimais. Periodinės Si rezonansinės distorsijos parodytos 24 pav. buvo gautos švitinimo proceso metu minkštaisiais Rentgeno spinduliais su variniu anodu, esant įtampai $U = 6$ kV, srovės stipriui 23 mA. Šis periodinis metastabilių būsenų populiacijos procesas ir sužadintų vakansijų generavimas gali būti paaiškinamas periodiniais dviejų lygmenų sužaditimais, formuojamais atomų metastabiliose Si kristalo būsenose.

Tam kad galėtumėme įvertinti periodines rezonansines distorsijas Si gardelėje, reikalingas energijos kiekis turi būti perduotas gardelei, kad galėtų vykti periodiniai rezonansiniai atomų perėjimai iš metastabilių būsenų į vakansijas. Tam turi būti naudojama reikiamo stiprumo srovė Rentgeno vamzdyje.

Energija, reikalinga sukurti vienai vakansijai minkštaisiais Rentgeno spinduliais yra lygi 4,507 eV. Reali vakansijų susidarymo energija yra maždaug 1 eV ir matyti, kad didžioji dalis absorbuotos energijos yra susijusi su gardelės sužadimais silicio kristale. Yra manoma, kad relaksacijos procesai silicio kristale, sužadinti minkštaisiais Rentgeno spinduliais, yra viena iš pagrindinių priežasčių greitai vakansijų difuzijai ar net superdifuzijai. Vakansijos buvo gautos švitinant 1 – 3 MeV elektronais, gama spinduliais ar greitais neutronais. Atrasta metastabilių vakansijų, generuotų minkštaisiais Rentgeno spinduliais, superdifuzija buvo kaip Ože efekto pasekmė. Difuzijos koeficientai šioms sužadintoms vakansijoms yra 10.000 kartų didesni negu vakansijų, sužadintų šiluminiu sužadinimu. Ože elektronų energijos siliciui yra mažesnės negu 1,8 keV, ir šie elektronai gali prarasti energiją dėl atomų, kurie supa atsiradusias vakansijas, jonizacijos, sužadinimo, nespindulinių multifononų perėjimų. Šie nespinduliniai perėjimai yra pagrindinė didelio intensyvumo fliktuacijų priežastis (23 pav.). Buvo pažymėta, kad fliktuacijos negali būti tiesiogiai siejamos su augančiu taškinių defektų tankiu.

Darbuose buvo tyrinėjamos labai greitai sužadintos vakansijos, kurių gyvavimas labai ilgas. Buvo nustatyta, kad vakansija gali turėti 5 skirtingas užkrovimo būsenas V^{2+} , V^+ , V^0 , V^- , V^{2-} . Intensyvumo relaksacijos yra parodytos 23 pav., jos yra kaip rezultatas gardelės osciliacijų, gautų nutraukiant rekonstrukcijos ryšius įvairiais būdais. Vakansijų lygmenys V^{2+} , V^+ yra 0,03 eV ir 0,13 eV aukščiau valentingumo juostos viršaus. Atsižvelgiant į tai, kad minimali netiesioginė skylių (kai $T = 300$ K) energija Si kristalui yra 1,12 eV, galime įvertinti, kad elektronų perėjimų energijos iš laidumo juostos į šias vakansijas yra pakankamos labai greitų neigiamai užkrautų vakansijų generacijai ir didelei gardelės relaksacijai. Taip pat šie periodiniai procesai priklauso nuo skirtingų difuzijos sugeneruotų vakansijų greičių, nuo priklausomybės Fermi lygmeniui ir užkrautų krūvio nešėjų tankio. Atsižvelgiant į Van Vechten pirminę reikšmių priklausomybę nuo vakansijų migracijos, dėl temperatūros pokyčių, galima paaiškinti atsirandančias trumpo veikimo jėgas, kurios nutraukia kovalentinius ryšius. Greitos gardelės osciliacijos sukeliančios atspindėtų fotonų intensyvumo pokyčius 23 pav. priklauso nuo trumpo spindulio jėgų, generuojamų Ože efekto. Silicio kristalo atomų lėtų osciliacijų vidutinis

kvadratinis nuokrypis yra parodytas 24 pav. Jis priklauso nuo ilgo nuotolio Kulono jėgų, veikiančių tarp difunduojančių užkrautų vakansijų gardelėje.

Silicis, kaip ir dauguma puslaidininkinių medžiagų, turi mažas atomų vibracijų amplitudes, dėl stiprių sp^3 mišrių ryšių. Aukštos Debajaus temperatūros yra priežastis silpnos atomų vidutinių nuokrypių priklausomybės nuo temperatūros.

Pagrindinė išvada padaryta iš gautų rezultatų yra ryšys tarp metastabilių vakansijų superdifuzijos ir silicio sužadinto kristalo gardelės relaksacijos. Buvo gauta, kad po 3 h švitinimo buvo pasiektos didelės gardelės relaksacijos. Po švitinimo buvo pamatuoti staigūs skylių judrumo pokyčiai p – tipo pavyzdyje ir skylių judrumo atsikūrimas po 1500 min. Mokslininkai įtaria, kad tai gali būti įtakojama užkraunant ir pakartotinai įkraunant vakansijų procesus.

Yra žinoma, kad Frenkelio poros, sukurtos elektronų, apšvitintos MeV dydžio energija ir gama spinduliuote turi labai didelį judrumą žemose temperatūrose. Priešinga situacija buvo gauta tyrinėjant savaiminę difuziją aukštose temperatūrose.

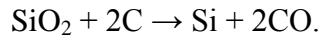
Norint gauti didelės koncentracijos mobilius Frenkelio defektus kambario temperatūroje privaloma sukurti defektus su žemos energijos švitinimu. Frenkelio defektai atlieka daug svarbesnį vaidmenį nei divakansijos, klasteriai ir kompleksai. Yra manoma, kad žadinimo energijos yra mažos, cheminiai Si atomų ryšiai, kurie yra išėję iš pusiausvyros padėties, nėra nutrūkę. Kai silicio kristalai yra sužadinti minkštaisiais Rentgeno spinduliais, elektrinis laidumas kinta tik dėl vakansijų. Kuriant Frenkelio defektus, yra pakankama 10 – 30 eV energija.

Vilniaus universiteto fizikų grupė, vadovaujama profesoriaus A. J. Janavičiaus gavo Frenkelio defektus kaip Ože efekto rezultata. Šie procesai gali būti kaip nešėjų perėjimų į gilesnius defektų energijos lygmenis rezultatas. Frenkelio defektai gali būti lengvai sukuriami, kai Ože perėjimai vyksta atomuose, kurių kaimynystėje yra priemaišos atomas.

6. Silicio plokštelių gamyba

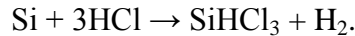
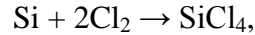
Silicis yra vienas labiausiai paplitusių elementų: jis sudaro maždaug ketvirtadalį Žemės plutos masės. Laisvas silicis gamtoje nesutinkamas. Labiausiai paplitęs silicio junginys yra silicio dioksidas. Jis sudaro iki 98 % kvarcinio smėlio masės.

Vadinamasis techninis silicis gaunamas kaitinant kvarcinį smėlį ir koksą 1500 – 2000 °C temperatūroje:

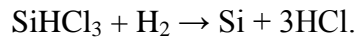
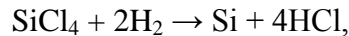


Techniniame silicyje daug priemaišų. Siekiant jas pašalinti, sudaromi silicio junginiai: silicio tetrachloridas SiCl_4 , chlorsilanas SiHCl_3 arba monosilanas SiH_4 .

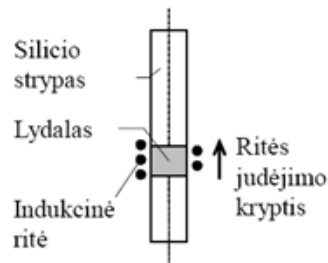
Silicio tetrachloridui ir chlorsilanui gauti panaudojamos šios reakcijos:



Sudaryti silicio junginiai gryninami daugiakartės distiliacijos ir rektifikacijos būdu. Po to iš išvalytų nuo priemaišų junginių vėl gaunamas silicis:



Gautas polikristalinis silicis dar gryninamas metalurginiais valymo būdais: zoniniu lydymu arba traukimu iš lydalo. Šie gryninimo būdai pagrįsti tuo, kad priemaišų tirpumas skystojoje ir kietojoje silicio fazėse yra nevienodas. Zoniniam lydymui naudojama elektromagnetinių virpesių energija (25 pav.).

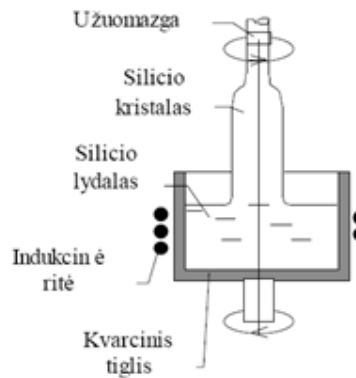


25 pav. Zoninis lydymas.

Šaltinis: Štaras S. Pusašaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai. Vilnius, 2005.

Silicio strype indukuojamos aukštadažnės sūkurinės srovės išlydo nedidelę strypo dalį (zoną). Slenkant aukštadažnei ritei išilgai strypo, ši zona juda kartu su ja. Kadangi siliciui kristalizuojantis didžioji priemaišų dalis lieka skystojoje fazėje, tai priemaišos kaupiasi išlydytoje zonoje ir slenka į apdorojamo strypo galą. Reikiamo grynumo silicis gaunamas naudojant daugiakartį zoninį lydymą. Priglaudus prie apdorojamo strypo galo silicio monokristalo užuomazgą, zoninio lydymo būdu galima pagaminti tam tikros orientacijos monokristalinio silicio strypą, tačiau gautame monokristale yra gana daug dislokacijų ($10^3 - 10^5 \text{ cm}^{-2}$).

Geresnės struktūros silicio monokristalai išauginami traukimo iš lydalo metodu, kurį dar 1918 metais pasiūlė Čochralskis (*Czochralski*). Taikant Čochralskio metodą, vakuuminėje kameroje į silicio lydalo panardinama silicio monokristalo užuomazga (26 pav.).



26 pav. Silicio monokristalo auginimas Čochralskio metodu.

Šaltinis: Štaras S. Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai. Vilnius, 2005.

Šią užuomazgą lėtai traukiant iš lydalo ir intensyviai aušinant kristalo ir lydalo sąlyčio sritį, vyksta silicio kristalizacija. Silicio monokristalas auga kaip kristalo užuomazgos tęsinys. Norint gauti apvalaus skerspjūvio monokristalą, tiglis su lydalu ir auginamasis monokristalas lėtai sukami priešingomis kryptimis apie vertikalią ašį. Jei reikia gauti legiruotą silicį, į lydalą įdedama reikiamų priemaišų. Kristalo augimo greitį lemia traukimo greitis (50 – 150 mm/h). Nuo traukimo greičio priklauso monokristalo skersmuo ir kokybė (defektų tankis, legiravimo tolygumas). Čochralskio metodu išauginami silicio monokristalų strypai, kurių skersmuo būna 150 – 300 mm, ilgis – iki 1,5 – 2 m.

Išauginto monokristalinio strypo paviršius būna nelygus, todėl strypas šlifuojamas. Po to nupjaunami jo galai ir, Rentgeno spindulių arba optiniu būdu patikslinus kristalo orientaciją, strypas pjaustomas į 0,4 – 0,8 mm storio plokšteles. Tam naudojami diskai su vidine ar išorine deimanto grūdeliais padengta pjovimo briauna.

Po pjovimo operacijos plokštelių paviršiai yra gana nelygūs, paviršiniuose sluoksniuose gali būti įskilimų ir kitokių defektų. Todėl plokštelės šlifuojamos – nušlifuojamas 60 – 100 μm storio paviršinis sluoksnis. Po to darbinis paviršius poliruojamas naudojant suspensijas su vis mažesnių matmenų (pabaigoje – smulkesniais nei 1 μm) abrazyvų grūdeliais. Po mechaninio poliravimo atliekamas cheminis dinaminis poliravimas – plokštelių paviršius ėsdinamas azoto, fluoro ir acto rūgščių mišiniu. Paviršiaus iškilimuose silicio atomų ryšiai su kristalu yra silpnesni, todėl cheminio poliravimo metu pirmiausia nuėdinami šie iškilimai.

Kiekvienos technologinės operacijos metu plokštelės gali būti užterštos. Todėl jų paviršiai rūpestingai valomi fiziniais ir cheminiais metodais. Riebalams nuo plokštelių paviršiaus pašalinti naudojami organiniai tirpikliai (benzenas (benzolas), toluenas (toluolas), spiritas), karštas

vandenilio peroksidas ir kitos cheminės medžiagos. Tirpalų likučiai kruopščiai nuplaunami distiliuotu ir dejonizuotu vandeniu.

Nuvalytas plokšteles reikia saugoti nuo užteršimo. Todėl integrinių grandynų gamybos patalpos turi atitikti griežtus technologinės higienos reikalavimus [2], [16].

7. Rentgeno spinduliuotės taikymas elektronikos prietaisų gamyboje

Grindžiant priemaišų superdifuzijos reiškinį kristalo tūryje teoriniu modeliu, atrastos labai greitai difunduojančios kambario temperatūroje nepusiausviros vakansijos, gyvuojančios daugiau kaip 1.5 val., generuotos minkšta Rentgeno spinduliuote Si kristale. Šis išradimas skirtas mikroelektroelektronikoje giliam priemaišų įterpimui į silicį atliekant antrą difuzijos stadiją mikroschemų gamybos procese, realizuojant labai greitą priemaišų difuziją Si kristale kambario ir neaukštose temperatūrose.

Išradimo teorinę dalį sudaro prof. A. J. Janavičiaus įvesta netiesinė difuzijos lygtis.

$$\text{---} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad (38)$$

kurios sprendiniai buvo naudojami eksperimentiniams rezultatams apdoroti ir interpretuoti. Baigtiniu greičiu vykstančią difuziją apibrėžia proporcingas priemaišų koncentracijai difuzijos koeficientas

$$\text{---} \quad (39)$$

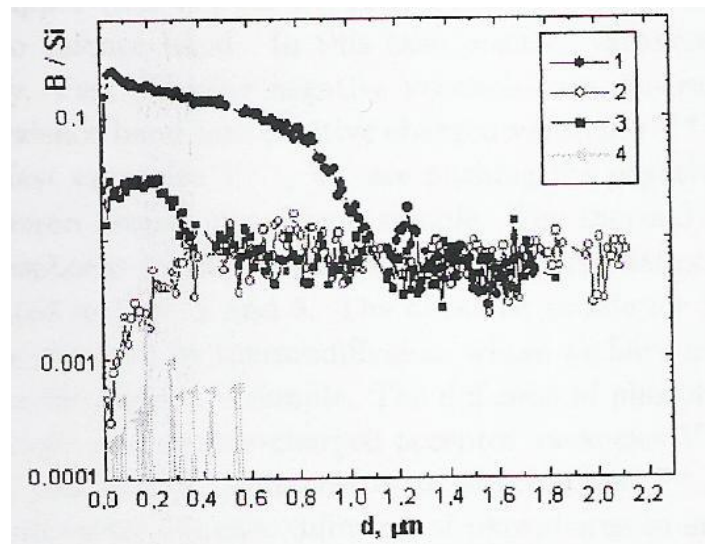
čia N_s yra priemaišų koncentracija kristalo paviršiuje, D_0 - priešeksponentinis daugiklis, o E yra aktyvacijos energija.

Netiesinės lygtys (38) ir (39) gali nusakyti difuziją sužadintose dviejų lygmenų sistemose, įsivedus temperatūrinę funkciją. Labai svarbu kad temperatūros funkcija tenkina Bolcmano statistikos sąlygas, aprašant užpildymo tikimybių ir santykį dviejų lygmenų ir sistemoje ir šiuo atveju gali būti panaudoti aprašyti difuzijai, kai visi atomai, dalyvaujantys difuzijos procese pradinio laiko momentu, yra sužadintoje būsenoje arba jie difunduoja sužadinate sistemoje. Tuomet pasinaudojus gautu netiesinės difuzijos lygties (38) sprendiniu, randame maksimalų difunduojančių priemaišų įsiskverbimo į kristalą gylį

$$\text{---}, \quad \text{---} \quad (40)$$

kuris kaip ir difuzijos koeficientas sužadintose sistemose priklauso nuo sužadavimo parametro α . Vykstant difuzijai sužadintose sistemose, kai $\alpha \rightarrow 0$ galime superdifuziją realizuoti, kuomet priemaišų arba vakansijų maksimalaus išsiskverbimo gylis per baigtinę difuzijos trukmę artėja į begalybę.

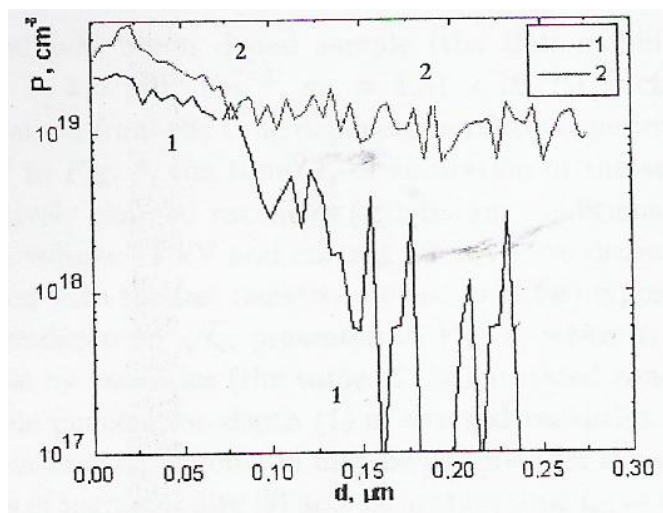
Profesorius A. J. Janavičius ir Vilniaus universiteto mokslų daktarai įvykdė šalutinio jono masės spektroskopiją (SIMS) (the Camera Riber System MIQ 156), kad gautų koncentraciją P ir B atomų profilius Si kristale kaip funkcijos gylio nuo Si paviršiaus. Rezultatus galima matyti 26 ir 27 pav. SIMS matavimai buvo įvykdyti naudojant pirminį (Ar^+) joną su 5 keV energijos spinduliu. Kalibruoti standartai yra svarbūs tiksliems SIMS matavimams. Laiko iki išsiskverbimo gylio pakeitimas buvo padarytas po gylio analizės. Kitas instrumentuotės efektas, kuris komplikuoja SIMS analizę, yra efekto riba. Norint gauti gerą gylio analizę, svarbu, kad signalas buvo analizuojamas nuo pagrindo dalies. Naudojant elektroninį šalutinio jono signalą ar lęšio sistemos perėjimą, galima aptikti tik jonus nuo centrinės dalies. Gylio masto tikslumas gali būti tik apytiksliai 15%.



27 pav. B ir Si santykis išmatuotas SIMS ir pateiktas grafiškai.

Šaltinis: Janavičius A. J., Balakauskas S., Kazlauskienė V., Mekys A., Purlys R., ir Storasta J. Superdiffusion in Si Crystal Lattice Irradiated by Soft X – Rays. // Acta Physica Polonica A, Vol. 114 (2008), No. 4.

B ir Si santykis išmatuotas SIMS ir pateiktas grafiškai: 1 – B po termodifuzijos, 2 – po 5 val. švitinimo (Cr anodas, režimas – 9 kV, 23 mA), 3 – nušlifavus 0,4 μm , 4 – kontroliniame pavyzdėlyje.



28 pav. P koncentracija išmatuota SIMS ir pateikta grafiškai.

Šaltinis: Janavičius A. J., Balakauskas S., Kazlauskienė V., Mekys A., Purlys R., ir Storasta J. Superdiffusion in Si Crystal Lattice Irradiated by Soft X – Rays. // Acta Physica Polonica A, Vol. 114 (2008), No. 4.

P koncentracija išmatuota SIMS ir pateikta grafiškai: 1 – pavyzdėlis po termodifuzijos, 2 – po 5 val. švitinimo.

Ožė procesas p – tipo silicyje šiuo atveju gali sukurti tikrai teigiamai įkrautas vakansijas V^+ , V^{++} su energijos lygmenimis silicio grupės tarpe, šalia valentingumo grupės. Rezultate elektronų perėjimo nuo valentingumo grupės į teigiamas vakansijas, jų krūviai tampa neigiami, ir vakansijų lygiai yra pakelti. Šiuo atveju teigiamos vakansijos, gaudamos energiją iš gardelės ir elektronų perėjimo, pavirsta į neigiamas ir atstato nutrauktus ryšius. Tos sužadintosios neigiamos vakansijos, dalyvaujančios superdifuzijos procese, buvo surastos Si kristalo laidumo matmenyse, apšviesto minkšta Rentgeno spinduliuote. Prieš ir po gardelės relaksacijos, lygmenys V^- ir V yra prasmingai aukštesni (0,6 eV, 0,3 eV) negu du lygmenys V^+ , V^{++} , kurie yra šalia valentinės juostos. Šiuo atveju teigiamos vakansijos didina p laidumą. Greitai difunduojančių neigiamų vakansijų naudojimu yra sukurtas elektronų perėjimas nuo valtingumo grupės į teigiamas įkrautas vakansijas V^{++} , V^+ . Difunduoiant greitoms vakansijoms nuo paviršių V^- , V pastumia neigiamus jonus, keičiančius boro atomus giliau į prisotintą silicio pavyzdį. Šiluminiai difuzijos boro ir fosforo profiliai silicyje ir profiliai po spinduliavimo pavyzdžio su Rentgeno spinduliais yra pristatyti 27 ir 28 pav. Gautas boro profilis iš esmės skiriasi nuo profilio, gauto termodifuzijoje, kur mes turime maksimalią boro koncentraciją pavyzdėlio paviršiuje. Fosforo difuzija silicyje yra sujungta su atskiromis ir dvigubai įkrautomis akceptorinėmis vakansijomis

V^{2-} . Priemaišos ir vakansijos pora ($P^+ V^{2-}$) atsiskiria į elektroną ir P^+ , V^- . Negatyvios vakansijos žymiai didina fosforo difuziją silicyje ir vykdo difuziją, esant kambario temperatūrai. Difuzijos profilis fosforui, įvestam spinduliuojant silicį, yra pristatytas 28 pav. Neutralios vakansijos taip pat gali dalyvauti boro ir fosforo difuzijoje.

Iš esmės buvo pasiūlytos naujos technologijos fotodiodų ir saulės elementų gamybai. Fotodiodai turi PN jungtis arba PIN struktūras. P ir N tipo silicyje PN arba PIN jungtys yra formuojamos naudojant joninę implantaciją arba difuziją prie aukštų temperatūrų 1050 – 1150 °C. Difuzijos procesai šiuo atveju sukuria silicio kristale defektus ir ženkliai sumažina elektronų ir skylių gyvavimo laiką. Srovės nešėjų gyvavimo laiko sumažėjimas pablogina fotodiodų ir saulės elementų efektyvumą ir charakteristikas. Naujos difuzijos procesų technologijos leidžia sumažinti pirmos difuzijos stadijos temperatūrą iki 850 °C tuo pačiu padidinant srovės nešėjų gyvavimo laiką, ko dėka mes galime tikėtis geresnių fotodiodų ir saulės elementų parametrų. Siūlomas technologijas galima naudoti bet kokių elektronikos prietaisų gamyboje, be abėjo pirmiausiai didelio našumo iki 25% saulės elementų gamybai. Naudodami superdifuzijos generuotos minkštais Rentgeno spinduliais technologijas, mes pagaminsime fotodiodus su galimai geresniais parametrais.

Šiomis dienomis jonizuojančiosios spinduliuotės panaudojimas leidžia taikyti pažangias technologijas ir duoda didelę ekonominę naudą. Rentgeno aparatai (rentgeno spinduliuotės generatoriai) dėl jų naudingų savybių taip pat plačiai naudojami pramonėje: įvairių gamybos procesų metu galimiems objektų defektams nustatyti, technologiniams procesams valdyti ir kontroliuoti – matuokliai, leidžiantys matuoti ir reguliuoti tokias gaminių savybes kaip storis, tankis, cheminė sudėtis ir kt. Oro uostuose ir pašto skyriuose kroviniams, keleivių bagažui, įvairioms siuntoms patikrinti naudojami bagažo saugumo kontrolės prietaisai, kai rentgeno spinduliais peršviečiami tikrinami daiktai ir galima aptikti įvairias tikrinamuose daiktuose esančias pavojingas medžiagas ar draudžiamus daiktus. Valstybės sienos perėjimo punktuose naudojama mobili įranga, kuri leidžia peršviesti stambiagabaritinius konteinerius ir sunkvežimius [12].

Išvados

1. Vakansijoms silicio monokristalo paviršiuje generuoti panaudota Rentgeno spinduliuotė. Teigiamai ir neigiamai įkrautos vakansijos, elgiasi kaip donorai ir akceptorai, padidindamos p – tipo silicio kristalo elektrinį laidumą.
2. Iš 21 pav. yra matoma, kad p – tipo kristaliniame silicyje kristalo laidumo didėjimas švitinant minkštais Rentgeno spinduliais yra susijęs su vakansijų generuotų kristalo paviršiuje difuzija į kristalo vidų.
Tiek sugeneruotų vakansijų tankis, tiek išskverbimo gylis šiuo atveju yra proporcingas \bar{L} (difuzijos trukmė) pagal netiesinę difuzijos teoriją atitinkančią Brauno dalelių judėjimą.
3. Iš 21 pav. mes matome, kad minkštais Rentgeno spinduliais silicyje yra generuojamos dviejų rūšių vakansijos, difunduojančios skirtingais greičiais.
4. 23 pav. matome, kad veikiant minkštais Rentgeno spinduliais pasireiškia kolektyviniai vakansijų generavimo ir anihilacijos efektai. Tyrimuose gauta tai, kad vakansijos generuojamos ne po vieną, bet kai kristalas apsorbuoja energiją yra generuojamas didelis vakansijų skaičius. Tai rodo ryšį tarp generuojamų vakansijų ir gardelės atomų svyravimų, nes apsorbuojant Rentgeno spindulių energiją didėja gardelės atomų svyravimų amplitudė ir energija, kuri gali būti perduota susidarantioms vakansijoms.
5. Relaksacijos procesai silicio kristale, sužadinti minkštaisiais Rentgeno spinduliais yra viena iš pagrindinių priežasčių greitai vakansijų difuzijai ar net superdifuzijai. Atrasta metastabilių vakansijų, generuotų minkštaisiais Rentgeno spinduliais, superdifuzija buvo kaip Ože efekto pasekmė. Difuzijos koeficientai šioms sužadintoms vakansijoms yra 10^4 kartų didesni, nei vakansijų, sužadintų šiluminiu sužadinimu.
6. Apšvitinus Rentgeno spinduliais, priemaišų difuzija silicyje vyksta pakankamai greitai net kambario temperatūroje, ir tai sudaro galimybę kurti aukštos kokybės mikroelektronikos įrenginius, išvengiant defektų, atsirandančių įvedant priemaišas termodifuzijos arba joninės implantacijos metodais.
7. Gauti rezultatai prisideda prie tolimesnio superdifuzijos teorijos vystymo ir gali būti taikomi, kuriant naujas technologijas.

Literatūros sąrašas

1. Karpus V. „Kietųjų kūnų fizika. Kristalinis būvis“, Vilnius 2002.
2. Štaras S., „Puslaidininkinės ir funkcinės elektronikos įtaisai“, 2005.
3. Tamašauskas A., Vosylius J., Požela I. Fizika 4. Vilnius, 1995.
4. Šlekienė V., Kietojo kūno fizikos paskaitų konspektas.
5. Kabailienė M., „Kristalografija“, Vilnius 2003 m.
6. Karenauskaitė V., Bagdonas S. ir kiti. Biomedicinos fizika kolegijų studentams. Vilnius, 2002.
7. Кашкаров П. К. Образование точечных дефектов в полупроводниковых кристаллах. Москва, 1999.
8. Janavičius A. J., Banys J., Purlys R., Balakauskas S. The diffusion coefficient of vacancies excited by X – rays in monocrystalline Si. // Lithuanian Journal of Physics, Vol. 42, No. 5, pp. 337 – 340 (2002).
9. Janavičius A. J. Atsitiktiniai procesai ir pernešimo reiškinių lygtys. Šiauliai, 2002.
10. Purlys R., Janavičius A. J., Mekys A., Balakauskas S. ir Storasta J. Electrical conductivity of Si and GaAs monocrystals excited by soft X – rays. // Lithuanian Journal of Physics, 2001, 41, No. 4 – 6, 376 – 380.
11. Janavičius A. J., Storasta J., Purlys R., Mekys A., Balakauskas S. ir Norgėla Ž. Crystal lattice and carriers Hall mobility relaxation processes in Si crystal irradiated by soft X – rays. // Acta Physica Polonica A, Vol. 112 (2007), No. 1.
12. Janavičius A. J., Balakauskas S., Kazlauskienė V., Mekys A., Purlys R., ir Storasta J. Superdiffusion in Si Crystal Lattice Irradiated by Soft X – Rays. // Acta Physica Polonica A, Vol. 114 (2008), No. 4.
13. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. Москва, 1978.
14. Šniuolis R. Inžinerinės medžiagos. Šiauliai, 2004.
15. Karazija R. Fizika humanitarams. Šiuolaikinė fizika II. Vilnius, 1997.
16. Integrinių grandynų gamybos procesai. Prieiga per internetą:
http://www2.el.vgtu.lt/electronics/Vadovelis%202009/10.%20IG%20gamyba_2009.pdf [žiūrėta 2013 – 01 – 20].