

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

**IRMA VASILIAUSKAITĖ**

**VAKANSIJŲ IR PRIEMAIŠŲ DIFUZIJA SUŽADINTUOSE Si**  
**KRISTALUOSE**

**Fizikos magistrantūros studijų programos „Fizika“**

**MAGISTRO DARBAS**

**Mokslinis vadovas**  
**Prof. habil. dr. ARVYDAS JUOZAPAS JANAVIČIUS**

**Šiauliai, 2007**

## **ANOTACIJA**

### Vakansijų ir priemaišų difuzija sužadintuose Si kristaluose

Baigiamąjį magistro darbą sudaro įvadas, 3 medžiagos dėstymo skyriai, pagrindinių rezultatų bei išvadų sąrašas, literatūros sąrašas. Įvade aprašytas temos aktualumas, tyrimo problemos, iškelta hipotezė, suformuluoti darbo tikslai ir uždaviniai. Pirmajame skyriuje aprašytos silicio kristalo savybės. Antrajame skyriuje apžvelgiamos pagrindinės difuzijos lygtys ir mechanizmai. Trečiajame skyriuje, remiantis bandinių elektrinio laidumo tyrimais bei teoriniu difuzijos sužadintose sistemose modeliu, rastos eksperimentinės vakansijų difuzijos koeficientų reikšmės.

## **ANNOTATION**

### Diffusion of vacancies and impurities in excited Si mono-crystals

This master work consists of introduction, 3 material enunciation chapters, basic results and conclusions list, literature list. In the introduction subject topicality, research problems and hypothesis are stated, work purposes and tasks are formulated. In chapter one features of the silicon mono-crystal are described. In chapter two basic diffusion equations and mechanisms are overviewed. In chapter three, with reference to samples' electrical conductivity researches, experimental values of the vacancies diffusion coefficients are founded.

# TURINYS

<b><u>IVADAS.....</u></b>	<b><u>3</u></b>
<b><u>1. PUSLAIDININKIO SILICIO SANDARA IR ENERGIJOS JUOSTOS.....</u></b>	<b><u>4</u></b>
1.1. Silicio kristalas.....	5
1.2. P-n sandūra.....	8
<b><u>2. DIFUZIJA SILICIO KRISTALUOSE.....</u></b>	<b><u>14</u></b>
2.1. Difuzijos procesų teorija.....	14
2.2. Tiesinė ir netiesinė difuzijos lygtis.....	17
2.3. Vakansijų grupavimas ir difuzija silicije: kinetinės gardelės Monte Karlo metodas.....	20
<b><u>3. SI KRISTALO DIFUZIJOS PARAMETRŲ SKAIČIAVIMAS.....</u></b>	<b><u>30</u></b>
3.1. Vakansijų sužadintų rentgeno spinduliais difuzijos koeficientas silicio monokristale...	30
3.2. Si kristalų elektrinis laidumas ir terminiu būdu generuotų vakansijų difuzijos koeficientas .....	36
<b><u>IŠVADOS.....</u></b>	<b><u>41</u></b>
<b><u>LITERATŪRA.....</u></b>	<b><u>42</u></b>

# IVADAS

Ketvirtadalį Žemės masės sudaro silicis. Mikroelektroninės technikos gamyba ir integralinės schemos labai išpopuliarino šį visur esantį cheminį elementą. Tai susiję su didėjančiu informacijos perdavimo greičio poreikiu, sąlygojančiu perėjimą nuo elektroninių signalų perdavimo grandinių prie šviesos grandinių, kurių elementai daugiausia gaminami iš silicio.

Silicio įrenginiai turi didesnę negu germanio uždraustą zoną, todėl jie gali dirbti didesnėse temperatūrose. Jis yra vienas iš paprastų puslaidininkių, kuris gamyboje naudojamas tik apdirbtas pagal tam tikrą technologinę schemą:

- Techninio silicio perdirbimas į lengvąjį silicį.
- Silicio išvalymas nuo įvairių priemaišų fiziniu ir cheminiu būdu.
- Švaraus silicio išskyrimas.
- Monokristalų užauginimas.

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 (III arba V grupės periodinės Mendelejevo sistemos) atomai.

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

**Tyrimo objektas.** Silicio kristalo taškiniai defektai.

**Tyrimo hipotezė.** Galimybė gauti vakansijas, naudojant Rentgeno spindulius.

**Tikslas.** Išnagrinėti ir įvertinti, priemaišų ir vakansijų difuziją sužadintuose Si kristaluose.

## **Uždaviniai:**

1. sukurti teorinį modelį, aprašantį difuziją sužadintuose Si kristaluose;
2. aprašyti svarbiausius ir naujausius rezultatus šioje srityje;
3. interpretuoti gautus rezultatus.

## **Tyrimo metodai:**

1. Mokslinės literatūros analizė.
2. Prognozavimas.
3. Statistinė analizė.
4. Modeliavimas.

# 1. PUSLAIDININKIO SILICIO SANDARA IR ENERGIJOS JUOSTOS

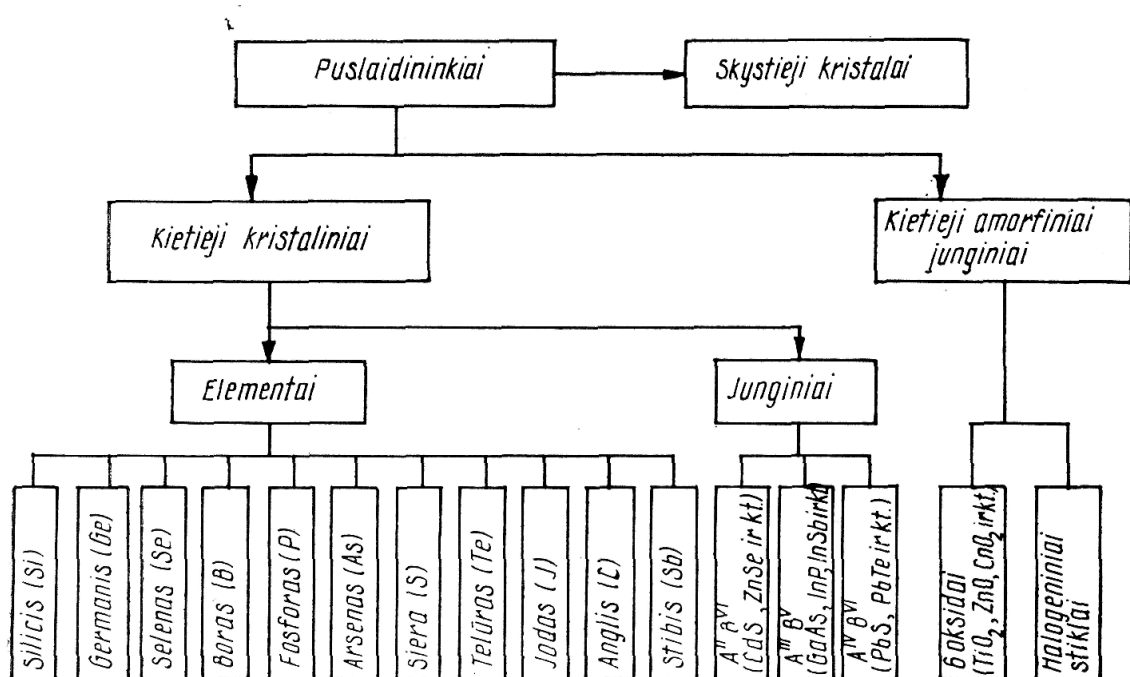
## 1.1. Silicio kristalas

Pagal struktūrą puslaidininkiai skirstomi į kietuosius kristalinius ir amorfinius, taip pat skystuosius kristalus (1 pav.). Visi kristalai priklausomai nuo gardelės tobulumo skirstomi į idealius, turinčius tobulą kristalinę gardelę, ir realius, turinčius kristalinės gardelės struktūrinių defektų, cheminių priemaišų ir dislokacijų. Realūs kristalai savo sudėtimi gali būti stechiometriniai ir nestechiometriniai.

Kristalo stechiometrija vadinamas jų sudėties (pagal svorį) proporcingumas atominiams svoriams jų cheminėje formulėje.

Kristalams apibūdinti naudojami įvairūs terminai:

**Elementarusis narvelis** – gretasienio pavidalo mažiausias kristalinės medžiagos tūris, kurį stumdant trimis nepriklausomomis kryptimis, galima gauti visą kristalą.

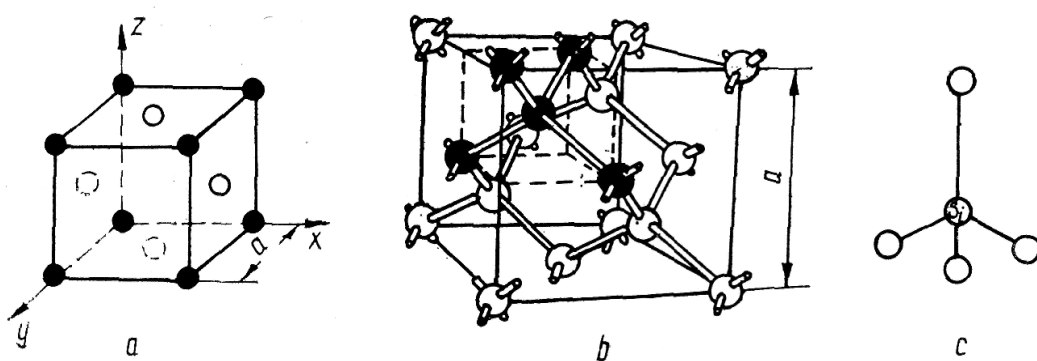


1 pav. Puslaidininkių klasifikacija.

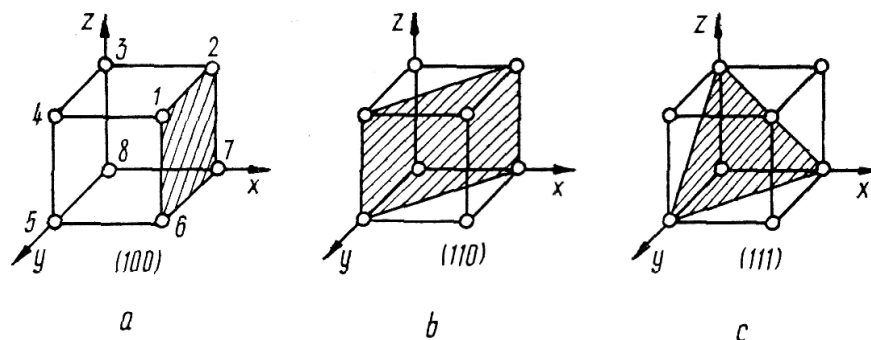
**Gardelės konstanta** – elementaraus narvelio ilgis vienos ašies kryptimi.

**Kristalografinės ašys** – ašys, rodančios kristalo kryptis išilgai elementaraus narvelio briaunų.

Kristalinės gardelės, tuo pačių ir kristalai, gali turėti įvairiausias formas – nuo paprasčiausios kubinės, kur atomai išsidėstę kubo kampuose, iki labai sudėtingų. Silicis turi deimanto tipo kubinę kristalinę gardelę. Jos elementarus narvelis susidaro iš dviejų centruotojo paviršiaus kubinių narvelių, pastumtų vienas kito atžvilgiu per  $\frac{1}{4}$  kubo įstrižainės (2 pav.). Atstumai tarp artimiausių tetraedrą sudarančių atomų – 0,24 nm, gardelės konstanta – 0,54 nm. Pusė atstumo tarp artimiausių atomų (tetraedrinis spindulys)  $r_0=0,118$  nm. Kadangi kristalai yra anizotropiniai, t.y. skirtingomis kryptimis turi skirtingas savybes, tai naudojant juos technologiniuose procesuose, reikia nustatyti jų kristalografines plokštumos orientaciją.



2 pav. Kubiniai elementarus narveliai: a – centruotojo paviršiaus, b – deimanto, c – silicio atomų ryšiai

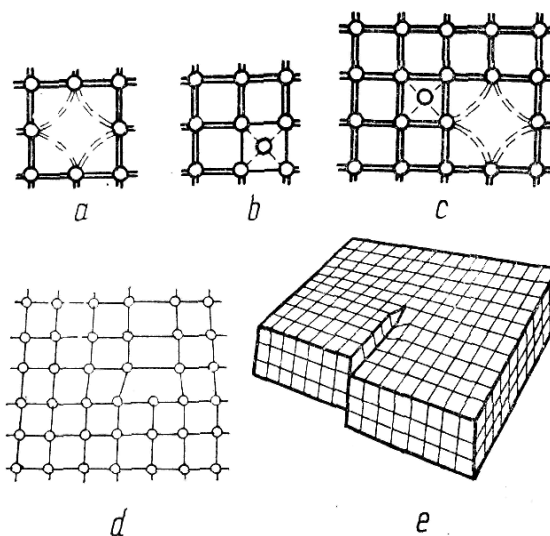


3 pav. Milerio indeksais pažymėtos kristalo plokštumos: a – x, y, z – kristalografinės ašys, einančios elementaraus narvelio briaunomis, (100) – plokštuma, atkertanti x ašyje briaunos a ilgio atkarpą ir lygiagreti plokštumai zy ( $m=a, n=p=0$ ); b, c – kitos kristalo plokštumos.

Kristalografinės plokštumos aprašomos Milerio indeksais, reiškiančiais atvirkštines koordinatas, kurios gaunamos kertant kristalografinę plokštumai tris kristalografines ašis (atitinkamai lygiagrečias trims elementaraus narvelio briaunoms ir susikertančias viename iš gardelės mazgų) Šios trys koordinatų reikšmės išreiškiamos mažiausiais sveikaisiais skaičiais be bendrojo vardiklio ir užrašomos apvaliuose skliaustuose

(3 pav.). Kryptys, statmenos atitinkamoms plokštumoms (kristalografinių ašių kryptys), užrašomos tais pačiais skaitmenimis laužtiniuose skliaustuose. Lygiagrečios plokštumos turi vienodus Milerio indeksus. Jei koordinatė neigiama, tai atitinkamas indeksas iš viršaus pažymimas brūkšneliu.

Realūs kristalai nuo idealių skiriasi tuo, kad turi struktūrinių defektų. Įvairūs jų tipai parodyti 4 paveiksle.



4 pav. Kristalų defektai: a) vakansija, b) tarpmazginis atomas, c) Frenkelio defektas, d) kraštinė dislokacija, e) sraigtinė dislokacija.

Silicis – IV grupės elementas, turintis 14-ą atominį numerį. Po deguonies silicis labiausiai Žemėje paplitęs elementas. Jis įvairiuose junginiuose sudaro apie ¼ Žemės plutos svorio ir labiausiai paplitęs silicio dioksido pavidalu. Laisvas silicis gamtoje nesutinkamas. Kristalinis silicis yra tamsiai pilka medžiaga, turinti metalinį blizgesį; kieta, trapi ir chemiškai gana inertiška. Pagrindinės silicio savybės surašytos 1-oje lentelėje. [1]

1 lentelė

### Silicio savybės

Fizikinis dydis	Vienetai	Sąlygos	Reikšmė
Atomo numeris			14
Atomo svoris			28,06
Lydimosi temperatūra	<sup>0</sup> C		1420
Tankis	g/cm <sup>3</sup>	300 K	2,329
Atomų skaičius 1 cm <sup>3</sup>	cm <sup>-3</sup>		5*10 <sup>22</sup>
Draustinės juostos plotis	eV	300 K	1,11
Elektronų judrumas (μ <sub>n</sub> )	cm <sup>2</sup> /Vs	300 K	1350
Skylių judrumas (μ <sub>p</sub> )	cm <sup>2</sup> /Vs	300 K	480

Elektronų difuzijos koeficientas ( $D_n$ )	$\text{cm}^2/\text{s}$	300 K	35
Skylių difuzijos koeficientas ( $D_p$ )	$\text{cm}^2/\text{s}$	300 K	12,5
Santykinė dielektrinė skvarba ( $\epsilon$ ) Si SiO <sub>2</sub>			12
			4
Priemaišos (akceptoriai)		0,1 eV	B, Al
Priemaišos (donorai)		0,1 eV	P, As, Sb
Griūtinio pramušimo lauko stiprumas	V/cm	300 K	$4 \cdot 10^5$
Savitoji varža $\rho$	$\Omega \cdot \text{cm}$	300 K	$2,5 \cdot 10^5$
Krūvininkų koncentracija (Ni)	$\text{cm}^{-3}$	300 K	$1,5 \cdot 10^{10}$
Gardelės konstanta	nm	300 K	0,543
Lūžio rodiklis Si			3,5
			1,46
SiO <sub>2</sub>			
Temperatūrinis linijinis plėtimosi koeficientas			$2,33 \cdot 10^{-6}/^\circ\text{C}$

## 1.2. P-n sandūra

Bet kokios medžiagos atomuose gali judėti tam tikromis orbitomis, kurių atstumai nuo branduolio griežtai fiksuoti. Kuo orbita toliau nuo branduolio, tuo didesnę energiją turi joje esantys elektronai. Dėl šios priežasties orbitos dažniausiai vadinamos atomo energijos lygmenimis. Didėjant cheminio elemento eilės numeriui, daugėja ir elektronais užpildytų lygmenų, pradedant esančiais arčiausiai atomo branduolio.

Kai atomas gauna iš išorės energiją, elektronas gali absorbuoti tam tikrą energijos porciją – kvantą – ir pereiti į aukštesnį energijos lygmenį. Grįždamas atgal į žemesnį lygmenį, elektronas tą energijos kvantą išspinduliuoja į aplinką.

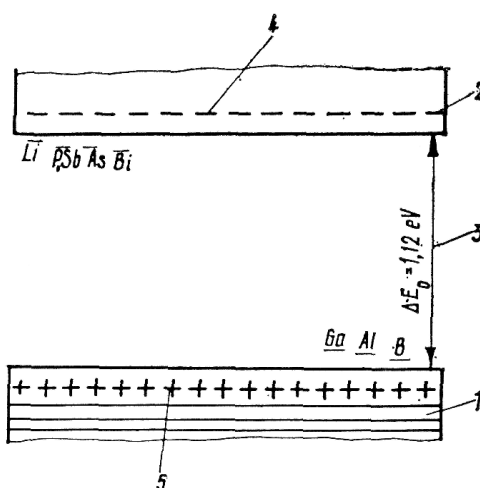
Silicyje ir kitose kietosiose kristalinėse medžiagose atstumai tarp atomų yra labai maži. Atomai tiek priartėja vienas prie kito, kad išorinėse orbitose esantys elektronai pradeda tarpusavyje sąveikauti. Dėl šios priežasties iš individualių elektronų orbitų (lygmenų) susidaro kolektyvinės ir atskirų atomų atitinkami energetiniai lygmenys susijungia į bendrus visai medžiagai kolektyvus – energijos juostas. Elektronai įgyja galimybę pereiti nuo vieno atomo prie kito nevertodami energijos.

Kiekvieną energijos lygmenį atome atitinka energijos juosta medžiagoje, o tarp tų juostų tarpai – draustinės juostos, kuriose elektronai negali būti. Mus domina tik dvi



juostos: viršutinė – laidumo ir žemiau jos esanti valentinė (5 pav.). Valentinė juosta vadinama absoliutaus nulio temperatūroje visiškai užpildyta elektronais juosta. Puslaidininkų ir dielektrikų laidumo juosta absoliutaus nulio temperatūroje yra tuščia, o metalų iš dalies užpildyta. Įvairių medžiagų draustinės juostos plotis yra skirtingas, puslaidininkų – nuo 0 iki 2 eV, dielektrikų – daugiau kaip 2 eV. Silicio draustinės juostos plotis 1,12 eV, germanio – 0,7 eV.

Išorinio elektros lauko veikiami elektronai gali judėti, kai yra nepilnai užpildytoje juostoje, nes tik tada šis laukas gali juos pagreitinti. Kai temperatūra yra aukštesnė už absoliutų nulį, tai elektronas dėl šilumos gali įgyti papildomą energiją, viršijančią draustinės juostos plotį, ir pereiti į laidumo juostą. Jeigu silicio elektronai, esantys valentinės juostos viršuje, absorbuos ne mažesnę kaip 1,12 eV energiją, tai jie pereis į laidumo juostą, o valentinėje juostoje liks laisvi lygmenys – skylės. Elektronai laidumo juostoje gali, veikiami elektros lauko, laisvai judėti, t.y. jie yra krūvininkai. Skylės valentinėje juostoje irgi yra krūvininkai.



**5 pav.** Silicio energijos juostos ir kai kurių jo priemaišų energijos lygmenys: 1,2 ir 3 – atitinkamai valentinė, laidumo ir draustinės juostos, 4 – elektronai, 5 – skylės.

Kambario temperatūroje vidutinė elektronų energija yra maždaug 0,04 eV, todėl tikimybė pereiti jiems iš valentinės į laidumo juostą yra nedidelė. 1 cm<sup>3</sup> silicio elektronų laidumo juostoje yra apie  $1,5 \cdot 10^{10}$ , tiek pat ir skylių valentinėje juostoje. Tame pačiame 1 cm<sup>3</sup> tūryje bendras silicio atomų skaičius yra apie  $5 \cdot 10^{22}$ , todėl kylant temperatūrai, puslaidininkų varža mažėja: daugėja krūvininkų – elektronų ir skylių.

Jeigu silicyje bus priemaišų iš kitos medžiagos atomų, tai jų leistinės energijos lygmenys gali išsidėstyti ir pagrindinių atomų draustinėje juostoje. Pavyzdžiui, V grupės elementų fosforo, stibio ir arseno valentinės juostos yra žemiau silicio laidumo juostos

atitinkamai tik per 0,04, 0,039 ir 0,0439 eV, o III grupės elementų boro, aliuminio, ir galio laidumo juostos yra tik per 0,046, 0,057 ir 0,065 eV nuo silicio valentinės juostos. Taigi dauguma V grupės elementų valentinių elektronų jau kambario temperatūroje pereis į silicio laidumo juostą, t.y. jie atiduos savo elektronus siliciui. Taip gaunamas elektroninio, arba n tipo, laidumo puslaidininkis. Atomų lygmenys netoli laidumo juostos vadinami donoriniais.

Į III grupės elementų laidumo juostą pereis valentiniai silicio elektronai ir valentinėje silicio juostoje susidarys skylės. Taip gaunamas skylinio, arba p tipo laidumo, puslaidininkis. Elementai ir jų lygmenys netoli silicio valentinės juostos vadinami akceptoriniais.

Dažniausiai į silicį įterpiamos donorinės priemaišos – fosforas ir arsenas, o akceptorinės – boras. Jos parinktos neatsitiktinai. Šių priemaišų tirpumo riba silicyje yra aukšta, pavyzdžiui, kai temperatūra 1100-1200 °C, tai fosforui ji lygi  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$ , arsenui –  $2 \cdot 10^{21}$ , o borui  $5 \cdot 10^{20}$ . Reiškia, galima sudaryti įvairaus laidumo p ir n sritis; praktikoje ta dažnai reikalinga. Šių priemaišų energijos lygmenys išsidėstę netoli laidumo ir valentinių juostų, todėl kambario temperatūroje jose bus daug krūvininkų, ir puslaidininkiniai prietaisai normaliai veiks.

Vidutinę elektronų ir skylių energiją atitinkantis lygmuo vadinamas Fermio lygmeniu; bet kokioje temperatūroje jis sutampa su lygmeniu, kurio užpildymo tikimybė lygi  $\frac{1}{2}$ . Gryno silicio Fermio lygmens energija  $E_F$  lygi maždaug pusei draustinės juostos pločio  $\Delta E_0$ , t.y. jis yra šios juostos viduryje. Donoriniuose ir akceptoriniuose puslaidininkiuose Fermio lygmuo yra viduryje tarp priemaišinio lygmens ir atitinkamai laidumo arba valentinės juostos. Prijungus įtampą, donoriniame puslaidininkyje srovę sudarys elektronai, esantys laidumo juostoje, o akceptoriniame - skylės valentinėje juostoje. Jie dar vadinami pagrindiniais krūvininkais. Kodėl gi srovės nesudaro skylės donoriniame lygmenyje, ištrūkus iš jo elektronams, ir analogiškai – elektronai akceptoriniame lygmenyje, kai jie ištrūksta iš valentinės juostos? Taip yra dėl to, kad priemaišų atomų koncentracija yra žymiai mažesnė už bendrą silicio atomų koncentraciją. Priemaišų atomai nutolę vienas nuo kito per keliolika atomų skersmenų, todėl elektronas, kad peršoktų nuo vieno priemaišos atomo link kito, turi praeiti pro kelis silicio atomus. Tai įmanoma tik tada, kai jo energija lygi silicio laidumo juostos energijai, o ne akceptorinio lygmens energijai. Taigi elektronai akceptoriniame ir skylės donoriniame lygmenyje judėti negali ir srovės nesukuria.

Dviejų sričių p ir n tipo puslaidininkyje visi laisvieji krūvininkai juda chaotiškai (šiluminis judėjimas), kol nėra išorinės įtampos. Elektronai pereina iš n srities, kurioje jų koncentracija didesnė, į p sritį, kurioje jų koncentracija mažesnė, o skylės, atvirkščiai, juda iš p srities į n sritį. Toks judėjimas vadinamas krūvininkų difuzija. Laisviesiems krūvininkams

perėjus sričių skiriamąją ribą, lieka nejudrūs jonizuoti (kristalinės gardelės) atomai (p srityje – neigiami, o n srityje – teigiami jonizuoti atomai). Taigi prie pat ribos susidaro sritis, kurioje trūksta laisvųjų krūvininkų. Šią sritį sudaro du vienodo didumo ir priešingo ženklo erdvinio krūvio sluoksniai (6 pav., a). Ji vadinama p-n sandūra. Sandūroje veikia abiejų sluoksnių krūvių sukurtas elektrinis laukas (vadinamas potencialinis barjeras), stabdantis tolesnę elektronų ir skylių difuziją. Potencialų skirtumas, kuriam esant elektronų ir skylių judėjimas pro skiriamąją ribą nutrūksta, vadinamas kontaktiniu potencialų skirtumu. Jeigu skirtingo laidumo puslaidininkio srityse priemaišų koncentracija yra nevienoda, tai sluoksnis, kuriame trūksta krūvininkų, mažos koncentracijos srityje bus storesnis negu didelės koncentracijos srityje maždaug tiek kartų, kiek vienos srities krūvininkų koncentracija mažesnė už jų koncentraciją kitoje srityje. Kai priemaišų koncentracija skiriasi 10-100 ir daugiau kartų, tokios p-n sandūros vadinamos vienpusėmis, nes p-n sandūra susidaro praktiškai tik mažesnės koncentracijos puslaidininkio srityje. Tokios sandūros žymimos  $n^+p$  arba  $p^+n$ . Viršutinis indeksas „+“ rodo sluoksnį su žymiai didesne priemaišų koncentracija.

Potencialinio barjero susidarymo procesas p-n sandūroje trunka tol, kol tikimybė elektronui n tipo puslaidininkyje įgyti energiją, lygią potencialiniam barjerui, lygi tikimybei elektronui patekti į laidumo juostą p tipo puslaidininkyje. Tada vienodos energijos elektronų abiejose srityse yra po lygiai. Atstumas nuo Fermio lygmens iki potencialinio barjero viršaus n tipo puslaidininkyje lygus atstumui nuo fermio lygmens iki draustinės juostos viršaus p tipo puslaidininkyje (6 pav.,b). Laidumo juostų apatinių lygmenų energijų skirtumas sudaro potencialinį barjerą.

Išorinė įtampa, prijungta prie p-n sandūros, silpnina arba stiprina jos vidinį lauką ir potencialinį barjerą. Jeigu šios įtampos neigiamas potencialas prijungtas prie n srities, o teigiamas – prie p srities, t.y. ji priešinga p-n sandūros potencialų skirtumui, tai ši vadinamoji tiesioginė įtampa mažina potencialinį barjerą. Energijos juostos atrodo taip, kaip pavaizduota 6 pav., c. Elektronams, esantiems n tipo puslaidininkio laidumo juostoje, reikia jau žymiai mažesnės energijos, kad jie galėtų pereiti į p sritį. Analogiškai ir skylėms, esančioms p srityje, pereiti pakanka mažesnės energijos. Vadinasi elektronų srautas iš p srities į n sritį padidėja, t.y. per p-n sandūrą teka srovė:

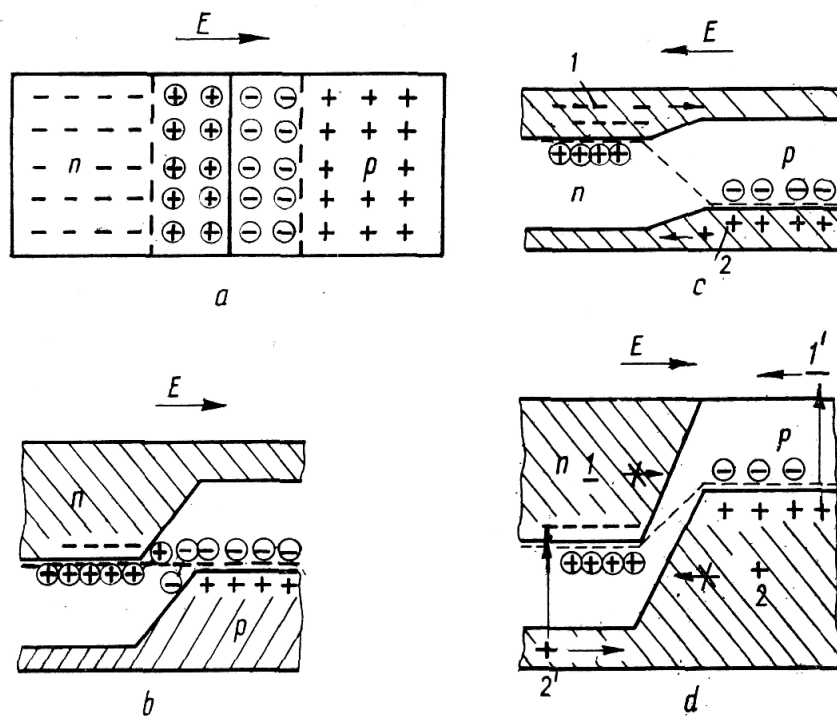
$$I = q * S \left( \frac{D_p * p_n}{L_p} + \frac{D_n * n_p}{L_n} \right) \left( e^{\frac{qU}{kT}} - 1 \right); \quad (1)$$

Čia  $q=1.6*10^{-19}$  C – elektrono krūvis,  $D_n$  ir  $D_p$  – elektronų ir skylių difuzijos koeficientai  $cm^2/s$ ,  $p_n$  ir  $n_p$  – skylių ir elektronų koncentracija atitinkamai n ir p tipo

puslaidininkyje  $\text{cm}^{-3}$ , S-p-n sandūros plotas,  $L_p$  ir  $L_n$  – skylių ir elektronų difuzijos nuotolis  $\text{cm}$ ,  $k$  – Bolcmano konstanta, lygus  $1,38 \cdot 10^{-23} \text{ 1/K}$ , T- absoliutinė temperatūra K, U – prijungtoji įtampa V. Elektronai patekę iš n srities į p sritį, o skylės – iš p srities į n sritį, tampa šalutiniais krūvininkais. Šis šalutini krūvininkų koncentracijos padidėjimo reiškinys vadinamas šalutinių krūvininkų injekcija. Injektuotos skylės difunduoja gilyn į n tipo puslaidininkį, kol susitinka su elektronais ir rekombinuoja. Todėl, tostant nuo užtvarinio sluoksnio, nepusiausvirųjų skylių tankis eksponentiškai mažėja. Taip pat elgiasi ir injektuoti elektronai p puslaidininkyje. Rekombinacija riboja prietaisų, kuriuose panaudojamas šalutinių krūvininkų judėjimas, matmenis krūvininkų judėjimo kryptimi.

Prijungus išorinę įtampą užtvarine kryptimi, t.y. prie n srities teigiamą, o p srities – neigiamą potencialą, ji stiprina vidinį elektrinį p-n sandūros lauką. Elektronai iš n srities ir skylės iš p srities traukiamos nuo p-n sandūros link išorinių kontaktų, užtvarinis sluoksnis plėtėja ir potencialinis barjeras padidėja (6 pav. d). Pagrindiniams krūvininkams, elektronams 1 iš n srities ir skylėms 2 iš p srities patekti į priešingas sritis reikalinga didelė energija. Galima parinkti tokią užtvarinę įtampą, kad pagrindinių krūvininkų srautai netekės. Tačiau kadangi yra ir šalutinių krūvininkų – elektronų 1' p srityje ir skylių 2' n srityje, kurie atsiranda ne iš priemaišų lygmenų, o perėję visą draustinę juostą, tai p-n sandūrą teka silpna atgalinė srovė. Ji silpna dėl to, kad elektronų, turinčių energiją, viršijančią draustinės juostos plotį, yra nedaug. Vadinasi, p-n sandūrą yra laidū viena kryptimi, o kita beveik nelaidi. Ji naudojama kaip diodas. Kaip įtampa prie jos prijungta užtvarine kryptimi, - kaip izoliatorius arba kondensatorius. Keičiant išorinę užtvarinę įtampą, galima praplatinti arba susiaurinti sluoksnį, kuriame trūksta krūvininkų. Šis efektas naudojamas vienpoliuose, arba lauko, tranzistoriuose su p-n sandūromis.

P-n sandūra gali būti elektriškai pramušta, jeigu užtvarine kryptimi bus prijungta didelė išorinė įtampa. Didelio stiprumo elektros laukas generuos daug elektronų ir skylių, srovė stiprės, sandūra kais, dėl ko dar daugiau atsiras krūvininkų ir stiprės srovė, kol pagaliau puslaidininkis suirs. [9, 87-112]



**6 pav.** P-n sandūra: a – erdvinio krūvio sluoksnių susidarymas,  $\oplus$  ir  $\ominus$  - jonizuoti atomai, „+“ ir „-“ – skylės ir elektronai,  $E$  – stabdančio elektrinio lauko kryptis; b – potencialinis barjeras, kai nėra išorinės įtampos; c ir d – atitinkamai energijos juostos, kai prijungta tiesioginė ir užtvarinė išorinė įtampa, 1 ir 2 elektronai ir skylės kaip pagrindiniai krūvininkai, 1' ir 2' – elektronai ir skylės kaip šalutiniai krūvininkai, „- - -“ – Fermio lygmuo.

## 2. DIFUZIJA SILICIO KRISTALUOSE

### 2.1. Difuzijos procesų teorija

Siekiant gauti norimą specifinę puslaidininkio varžą, į kristalą įterpiami kito elemento atomai, t.y. jis legiruojamas reikiamomis priemaišomis.

Praktikoje naudojami du pagrindiniai legiravimo būdai: tūrinis ir paviršinis legiravimas. Tūrinis legiravimas naudojamas auginant monokristalus arba vykdant epitaksiją, kai priemaišos turi būti tolygiai pasiskirsčiusios viename tūryje arba jo dalyje. Paviršinis legiravimas atliekamas įterpiant priemaišas į nedidelį gylį; jis gali būti bendras visam paviršiui, arba lokalinis. Paviršinis legiravimas skiriasi nuo tūrinio ne tik gyliu, bet ir netolygiu priemaišų pasiskirstymu legiruotame sluoksnyje. Pagrindiniai paviršinio legiravimo būdai yra difuzija ir jonų implantacija.

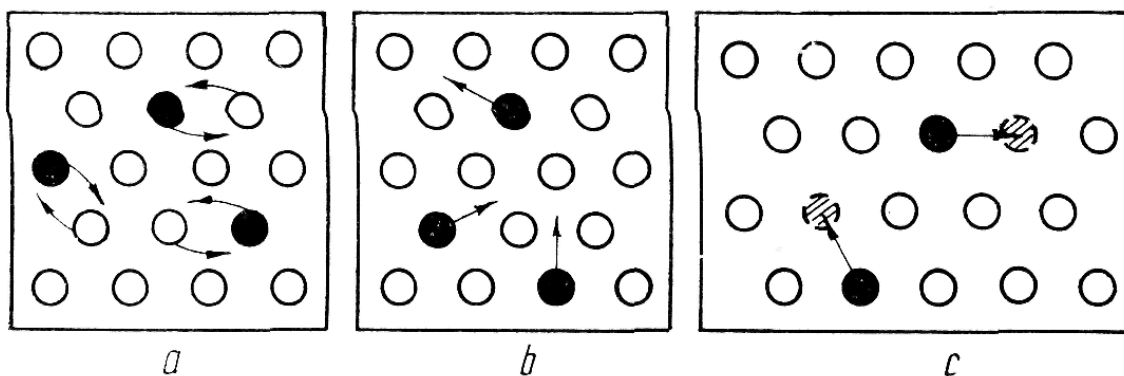
Difuzija vadinamas medžiagų sklidimas dėl atomų, molekulių, jonų arba kitų dalelių judėjimo; ji vyksta dėl difunduojančios medžiagos koncentracijos gradiento. Kietuosiuose kūnuose pakėlus temperatūrą aukščiau negu pusė medžiagos lydymosi temperatūros (pasiekus Tomsono temperatūrą), atomų judėjimas gardelėje intensyvėja ir sukelia difuziją. Energija, reikalinga atomo šuoliui kristalinėje gardelėje, vadinama difuzijos aktyvacijos energija.

Kietųjų kūnų gardelėse atomai gali judėti pasikeisdami vietomis su gretimais atomais, peršokdami į tuščius kristalinės gardelės mazgus (vakansijas), arba į tarpmazgius (7 pav.). Galimi ir sudėtingesni judėjimo mechanizmai. Konkrečiai priemaišų atomų difuzija priklauso nuo jų padėties kristalinės gardelės atžvilgiu.

Priemaišų atomai kristalinėje gardelėje gali išsidėstyti tarpmazgiuose ir judėti iš vieno tarpmazgio į kitą. Silicyje taip elgiasi periodinės sistemos I ir VIII grupių elementai. III ir V grupių elementai, kaip ir boras, fosforas ir arsenas, užima tuščius silicio kristalinės gardelės mazgus ir juda peršokdami į gretimas vakansijas (vakansinis difuzijos mechanizmas).

Atomai kristale juda chaotiškai, t.y. judėjimo tikimybė visomis kryptimis yra vienoda.

Sakykime, tam tikru laiko momentu  $t_1$  priemaišų atomai užima tik tam tikrą kristalinės gardelės sritį. Kitu momentu  $t_2=t_1+\Delta t$  dėl vienodos tikimybės judėti visomis kryptimis pusė atomų, esančių prie skiriamosios ribos, pereis į neužimtą sritį. Laiko momentu  $t_3=t_2+\Delta t$  pusė prie naujos ribos esančių atomų pasislinks toliau, o jų vietą užima kiti atomai, t.y. difuzija vyks priemaišų koncentracijos mažėjimo kryptimi. [7]



7pav. Atomų judėjimas kristale vykstant difuzijai; a - pasikeitimas vietomis; b – peršokimas į tarpmazgius; c- į vakansijas

Difuzijos proceso greitį apibūdina difuzijos koeficientas. Terminis priemaišų difuzijos koeficientas  $D$  paprastai išreiškiamas kvadratiniais centimetrais per sekundę ( $\text{cm}^2/\text{s}$ ). Jo skaitinė reikšmė reiškia dalelių, praeinančių pro  $1 \text{ cm}^2$  plotą per  $1 \text{ s}$ , kai priemaišų koncentracijos gradientas lygus  $1 \text{ cm}^{-4}$ .

Kylant temperatūrai, taškinių defektų skaičius kristale didėja kartu su difuzijos koeficientu. Difuzijos koeficientas puslaidininkyje ima priklausyti nuo priemaišų koncentracijos didėjimo. Kylant temperatūrai, difuzijos koeficientas sparčiai didėja. Priklausomybė  $D(T)$  išreiškiama Arenijaus lygtimi:

$$D = D_0 e^{(-\Delta E/kT)} \quad (2)$$

čia:

$D_0$  - proporcingumo koeficientas;

$E$  – difuzijos aktyvacijos energija; germanyje esančių priemaišų ji lygi  $2,2-2,6 \text{ eV}$ , o silicyje –  $3,5-4,3 \text{ eV}$ ;

$k$  - Bolcmano konstanta;

$T$  - difuzijos proceso temperatūra.

Koeficientas  $D_0$  priklauso nuo puslaidininkio ir priemaišų tipo, kristalografines krypties, kuria vyksta difuzija, ir pradinės priemaišų koncentracijos. Aktyvacijos energija  $W_a$  priklauso nuo puslaidininkio, priemaišų tipo ir difuzijos mechanizmo. Jei į silicį difunduoja boras, tai  $W_a \cong 3.7 \text{ eV}$ ; jei fosforas –  $4.4 \text{ eV}$ .

Kadangi koeficientas  $D_0$  ir aktyvacijos energija  $W_a$  priklauso nuo daugelio faktorių, tai (2) lygtis gerai tinka tik difuzijos koeficiento  $D$  priklausomybių nuo  $T$  ir  $W_a$  pobūdžiui išreikšti. Praktikoje priemaišų difuzijos koeficientas randamas iš literatūroje pateikiamų grafikų, sudarytų remiantis eksperimentų rezultatais.

Difuzijos teorija pagrįsta dviem dėsniais, kuriuos 1855 m. suformulavo šveicarų mokslininkas A. Fikas (Fick).

Pirmasis Fiko dėsnis apibūdina vienos medžiagos atomų skverbimosi į kitą medžiagą greitį, kai šių atomų srautas ir koncentracijos gradientas užrašomas tokia formule:

$$\bar{I} = -D \cdot \Delta N \quad (3)$$

$I$  – difunduojančių atomų srauto tankio vektorius (skaičius atomų, prasiskverbiančių pro ploto vienetą per laiko vienetą);  $D$  – difuzijos koeficientas;  $N$  – difunduojančių atomų koncentracijos vektorius tūrio vienetė;  $\Delta$  – gradiento operatorius.

Ši lygtis nusako, kad difunduojančių atomų srauto tankis yra proporcingas koncentracijos gradientui. Minuso ženklas rodo, kad difuzija vyksta koncentracijos mažėjimo kryptimi.

Jeigu manytume, kad mus dominanti difuzija vyksta tik viena kryptimi – į gylį  $x$  (vertikalią difuziją į plokščią lygiagrečią struktūrą), tai lygties (3) vienmatė išraiška bus tokia:

$$I = -D \frac{\partial N(x,t)}{\partial x} \quad (4)$$

Kai  $\frac{\partial N(x,t)}{\partial x} = 1$ ,  $I = -D$ , t. y. difuzijos koeficientas lygus srautui su priešingu

ženklui. Kai  $\frac{\partial N(x,t)}{\partial x} = 0$ ,  $I = 0$ , t. y. kai koncentracijos gradiento nėra – nėra ir srauto.

Antrasis Fiko dėsnis: nusako priemaišų kaupimosi greitį statmeną difuzijos kryptį. Priemaišinių atomų koncentracijos pasikeitimas tūrio vienetė per laiko intervalą turi būti lygus šių priemaišų difuzijos srauto sumažėjimui tokiam pat tūryje, t. y.

$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial x} = - \frac{\partial I(x,t)}{\partial x} \quad (5)$$

Lygtį (4) įrašę į lygtį (5), gausime antrąjį Fiko dėsnį, taikomą vienmatei erdvei:

$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D \frac{\partial N(x,t)}{\partial x} \right] \quad (6)$$

Kai priemaišų koncentracijos yra mažos, difuzijos koeficientas  $D = \text{const}$ , lygtį (6) galime užrašyti taip:



$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N(x,t)}{\partial x^2} \quad (7)$$

Trimatės erdvės lygtis (7) atrodo taip:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial z^2} \right), \quad (8)$$

Arba: 
$$\frac{\partial N}{\partial t} = D \cdot \Delta \cdot N,$$

Čia  $\Delta$  – Laplaso operatorius.

Difuzijos koeficientas  $D$  priklauso nuo temperatūros, priemaišinių atomų ryšio energijos kristalinėje gardelėje, vakansijų koncentracijos, gardelės konstantos ir kitų dydžių. [6, 197-208]

## 2.2. Tiesinė ir netiesinė difuzijos lygtis

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

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

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

$$l = \frac{1}{\sqrt{2ps^2n}}, \quad \langle v \rangle = 1.6 \sqrt{\frac{RT}{M}} \quad (9)$$

Čia  $D_d$  - dujų savidifuzijos koeficientas, proporcingas vidutinio laisvojo kelio  $\lambda$  ir vidutinio greičio ( $v$ ) sandaugai.  $\pi d^2$  yra judančios dujų molekulės poveikio skerspjuvio plotas arba efektinis skerspjuvis. Difuzijos kietų kūnų  $D_k$  koeficientą gauname naudodamiesi Brauno dalelių nuokrypio kvadrato formule  $\langle x_N^2 \rangle = NL^2$ ,  $N = \frac{t}{\tau}$ , kur  $\tau$  - vidutinė šuolio trukmė) ir

Gibso pasiskirstymo formule atsižvelgdami į tai, kad trimačiu atveju pasirinkta kryptimi įvyks tik 1/6 viso skaičiaus elementariųjų netvarkingų  $d$  ilgio šuoliukų. Jų ilgis apytiksliai lygus pagrindiniams kristalo gardelės periodams,  $v$  yra difunduojančių dalelių šuolių dažnis.  $W_f$  ir  $W_m$  yra atitinkamai vakansijų formavimosi ir jų judėjimo (atomo peršokimo į tuščią vietą) energijos, kurių sumą vykstant difuzijai, dalyvaujant vakansijoms arba kitiems difuzijos mechanizmams vadiname difuzijos aktyvacijos energija  $W$ . Atsižvelgdami į aktyvacijos energijos temperatūrinę priklausomybę, pateiktą  $D_k$  išraišką, galime naudoti ir skysčių difuzijos koeficientams skaičiuoti.

Naudojantis formulėmis, nusakančiomis difunduojančias medžiagas (9), galime išvesti difuzines lygtis.

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

$$-\oint_S D \operatorname{grad}(n) dS \quad (10)$$

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

$$-\int_V \frac{\partial n}{\partial t} dV \quad (11)$$

Pasinaudoję dalelių skaičiaus tvermės dėsniu ir sulyginę (10) su (11) randame:

$$-\oint_S D \operatorname{grad}(n) dS = \int_V \frac{\partial n}{\partial t} dV \quad (12)$$

Kairiajai lygybės pusei pritaikę Gauso-Ostrogradskio teoremą gauname lygybę:

$$\int_V \operatorname{div}(D \operatorname{grad}(n)) dV = \int_V \frac{\partial n}{\partial t} dV \quad (13)$$

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

$$\overline{\text{div}(D\text{grad}(n))dV} = \frac{\partial n}{\partial t} dV \quad (14)$$

Pirma netiesinė difuzijos lygtis:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} (D(x)n) \quad (15)$$

Antra kitokios formos netiesinė difuzijos lygtis:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x) \frac{\partial n}{\partial x} \right) \quad (16)$$

Užrašomas pirmas ir antras netiesinės difuzijos lygtys naudojant baigtinių skirtumų metodą:

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} = \frac{1}{h^2} (D_{k+1}n_{k+1} - 2D_k n_k + D_{k-1}n_{k-1}), \quad (17)$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} = \frac{1}{h^2} (D_{k+1/2}(n_{k+1} - n_k) - D_{k-1/2}(n_k - n_{k-1})) \quad (18)$$

Netiesinė lygtis (17) yra suderinama su Fokerio ir Planko lygtimi. Ji tinka difuzijai, vykstančiai kristalų tarpmazgiais, aprašyti. Tuo tarpu lygtyje (18) difuzijos koeficientas apibrėžiamas dviejų gretimų pusiausvyrų padėčių viduryje ir priklauso nuo abiejų būvio, dėl to ji nesuderinama su Fokerio ir Planko lygtimi. Tai atitinka tą atvejį, kai difuzija vyksta dalyvaujant vakansijoms. [5]

## 2.3 Vakansijų grupavimas ir difuzija silicije: kinetinės gardelės Monte

### Karlo metodas

Difuzija ir vakansijų grupavimasis silicijoje ištirtas kinetiniu gardelių Monte Karlo metodu. Surasta, kad aukštesnėje temperatūroje susidaro didesnės grupelės su trumpesniu vidutiniu gyvavimo laikotarpiu, kuris auga pritraukiant laisvas vakansijas, kol grupelės auga prie žemesnės temperatūros iš mažesnių grupelių. Ilga sąveika svyruoja padidindama difuzijos produkciją ir keletą grupelių. Didesnės vakansijos koncentracija sudaro daugiau grupelių su keletu laisvų vakansijų, bet grupelių dydis žymiai nuo to nepriklauso. Šio dėsnio eksponentė pateikta didėjant koncentracijai fiksuotoje temperatūroje, ir temperatūros mažėjimas nustatytoje koncentracijoje. [11]

Į silicio kristalą įterpus joną, atsiranda defektas kristalo gardelėje. Žemesnės energijos implantuoti jonai 10-100 keV diapazonuose sukuria gardelių vakansijas ir tarpmazginius defektus, kurie daugiausia rekombinuoja per atkaitinimą, kai įdiegti jonai pasilieka kaip defektai gardelėse. Aukštos energijos jono įterpimas MeV diapazone sudaro atstumą tarp vakansijų sluoksnio ir tarpmazgių atomų, taigi įvyksta trumpa rekombinacija. Vakansijų sluoksnis arti paviršiaus ir tarpmazgių atomų sluoksnis formuojasi giliai silicijoje. Padidinta difuzija iš kitų defektų, toks kaip Sb, aukštos energijos Si implante, parodo vakansijos sluoksnio egzistavimą arti paviršiaus. Vakansijos arti paviršiaus silicijoje gali būti naudojamos kontroliuoti įdiegtų priemaišų difuziją, tokių kaip boras, kuris jautrus padidintai trumpalaikiai difuzijai. Tarpmazgių atomų pertekliaus susidarymas dėl boro implantavimo, rekombinuoja su vakansijomis, sukurtomis aukštos energijos silicio priemaišų, apribojantis boro priemaišų difuziją. Eksperimentiniais stebėjimais vakansijos sluoksnių išsilaikymas po atkaitinimo parodo stabilų vakansijų grupelių susidarymą.

Pagal keletą teorinių proceso aprašymų, tuštumos susidarymo silicijoje egzistavimas, didelių grupelių augimas mažesnių grupelių sąskaita imituoja mažesnių grupelių atsiskyrimą ir jų sudėtinių dalių absorbcija į didesnes grupeles. Bongiorno ir Kolumbo pavartojo Stlinger-Weber potencialą ir molekulinę dinamiką, kuri parodo, kad įtampos laukai iškraipo silicio gardeles arti vakansijų. Vykdamas grupelių, turinčių daugiau nei 17 vakansijų, skaičiavimus galima rasti tas grupeles, kurios forma uždara, pavyzdžiui, šios grupelės su 6 ir 10 vakansijomis, yra nepaprastai stabilios. La Magna naudojo gardeles Monte Karlo metodo pritaikymui, tirti vakansijų grupelių susidarymui. Jie surado, kad didelis labai

stabilių grupelių kiekis su 6, 10 ir 14 vakansijų. Pavartojo pratęstą Isingo modelį, kuris paaiškino artimiausią kaimyninę sąveiką. Didesnės ir mažesnės grupelės buvo pastebėtos judant per gardeles, formuojant dideles grupes. Chakravarthi ir Dunhau naudojo 10 min. atkaitinimo modelį vakansijų grupelių augimui silicyje tyrimui. Jie pastebėjo aukštą paplitimą stabiliam rate grupelės su 6, 10 ir 14 vakansijų. Prie žemos temperatūros (750 °C) pastebimos mažos grupelių vakansijos, o prie aukštesnės temperatūros (950 °C) dominuoja didelės grupelės. Prasad ir Sinno naudojo molekulinę dinamiką modeliuoti vakansijų grupelių susidarymo energetiką ir naudojo šią informaciją plėtoti grupelės agregatams, kuri parodė difuzijos svarbumą mažose grupelėse, negaliojančiame susidaryme. Šie modeliai privalo aprašyti, mažas vakansijų grupes silicyje, kaip jie susirenka ar jie difunduoja arba atsiriboja. Pakeitimas virš temperatūros diapazonų arba koncentracijos nėra aprašytas šiuose modeliuose. Kinetinis gardelės Monte Karlo modelis ištiria vakansijos grupelių susidarymą ir mechanizmus, kaip auga grupelės, temperatūros funkciją, koncentraciją, sąveikos diapazoną. Difuzijos koeficiento  $D$  laikinė priklausomybė yra ištirtas kiekvienoje sekcijoje:

$$D(t) \sim t^{-\gamma} \quad (19)$$

kinetinis gardelės Monte Karlo metodas naudotas imituoti atominį padėtį difuzijos procese. Gardelių defektai ištirti atsitiktine tvarka ir jeigu judėjimas į kaimyninę vietą leistinas, tai bandoma pajudinti kiekvieną defektą vienu metu. Defektai gali turėti ir pradinius defektus, kurie apriboja vakansijas šiame darbe. Dėl galimų judėjimų vakansijos keičia gardelių vietas su gardelių atomais arba kitomis vakansijomis. Panaudojome Metropolisio algoritmą su detaliu balansu, kuris nulemia ar bus nauja konfigūracija realizuota. Jeigu judėjimas nesumažina sistemos energijos, taip realizuota su tikimybe  $e^{-\Delta E/2kT}$ , kur  $k$ -Bolcmano konstanta,  $T$ - sistemos temperatūra ir  $E$ - yra sistemos energijos pakitimas, kaip judėjimo rezultatas. Sistemos energija kiekvienoje konfigūracijoje yra poros sąveika tarp defektų. Dydis poros sąveikos duoda atskirimą gardelėse.

Laiko KLMC imitacija išdėstyta judrumo dažniu,  $\nu_H^v$  vakansijų, kuris nustatytas:

$$\nu_H^v = \nu_0^v e^{\frac{-E}{kT}} \quad (20)$$

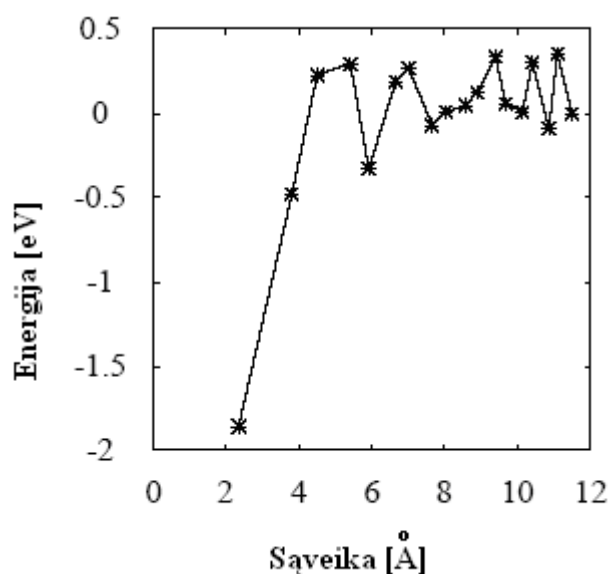
kur  $\nu_0^v$  - pradinis dažnis,  $E$  – energijos barjero judėjimas į artimiausią kaimyninę padėtį. Šiame darbe, naudojame  $\nu_0^v$  – skaičiavimus su išreiškimu

$$\nu_0^v = \frac{8 * D_0^v}{a_0^2} \quad (21)$$

ir dydis  $D_0^v=1,18 \cdot 10^{-4}$  cm<sup>2</sup>/s ir  $E=0,1$  eV, parodo žemo dažnumo vakansijos difuziją, ir gardelės konstantą 5,43 Å<sup>0</sup>. Šis dydis  $E$  yra mažesnis už 0,2 eV naudojant kitų autorių, bet energijos barjeras vienos vakansijos difuzijos gali būti apskaičiuotas iš žinomos žemo tankio sistemos. Po kiekvieno KLMC žingsnio, kuris aptinka atsitiktinius defektus sistemoje, imitacijos laikas yra augimas konstantos laiko žingsniu, kuris yra keitimasis vakansijos su silicio gardele, pagal  $v_H^v$  duoda formulę antrą. Atnaujinantis sistemos laiką leidžia kitą nuo laiko priklausančią difuzijos koeficiento formulę:

$$D_{t_1, t_2}^v = \frac{\langle [r_i(t_2) - r_i(t_1)]^2 \rangle}{6(t_2 - t_1)} \quad (22)$$

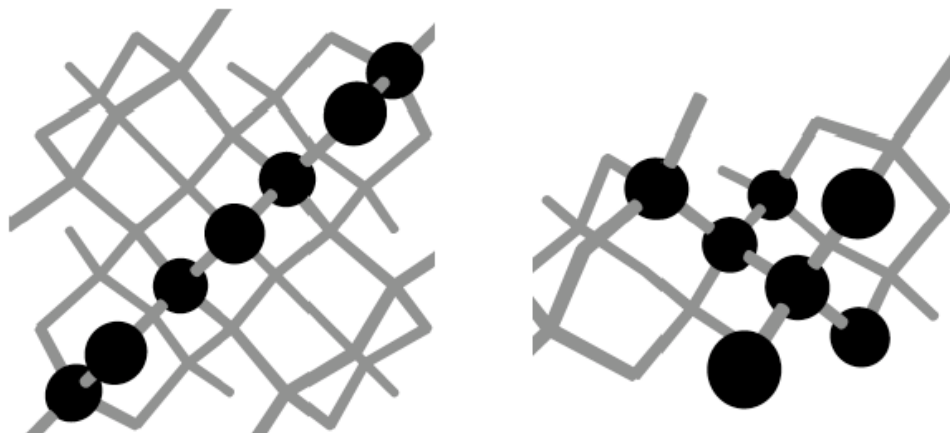
Ši formulė priartina termodinaminį difuzijos koeficientą, kol leidžia difuzijos tyrimas per įvairius laiko tarpus ( $t_2-t_1$ ).



8 pav. Vakansijos porų sąveikos energijos.

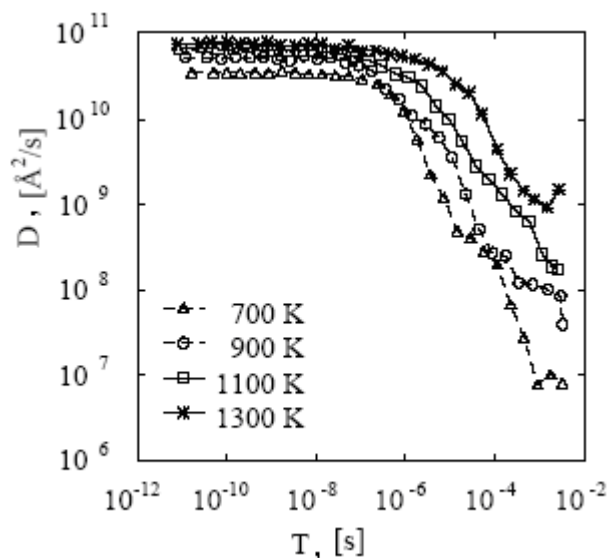
Paskaičiuota sąveikų energija pateikta 8 pav. Sumažintos konfigūracijos energija buvo užfiksuota ir procesas buvo pakartotas visais galimais atsiskyrimo atvejais. Pakeisti dydžiai buvo užfiksuoti, kaip sąveikos poros vakansijų energija. Procesas supaprastintas, perkeliant energijos rezultatus sąveikose, kuriose atrodo stipriai artinantis kaimynines padėtys ir silpnai atstumias didesnius atsiskyrimus. Sąveikos energijų forma buvo įtraukta į KLMC modelį. Dėl kiekvienos vakansijų konfigūracijos KLMC imitacijos, sistemos energija buvo apskaičiuota suma iš visų porų sąveikos tarp vakansijų. Atskiros vakansijos nebuvo leistos užimti vienu laiku tą pačią gardelės vietą.

Po kiekvienos sistemos parametrų derinys, penki imitavimai su skirtingais atsitiktiniais pirminiais vakansijų paplitimais buvo įvykdyti, vidutiniai rezultatai pateikti. Defektai buvo aptikti atsitiktinai.

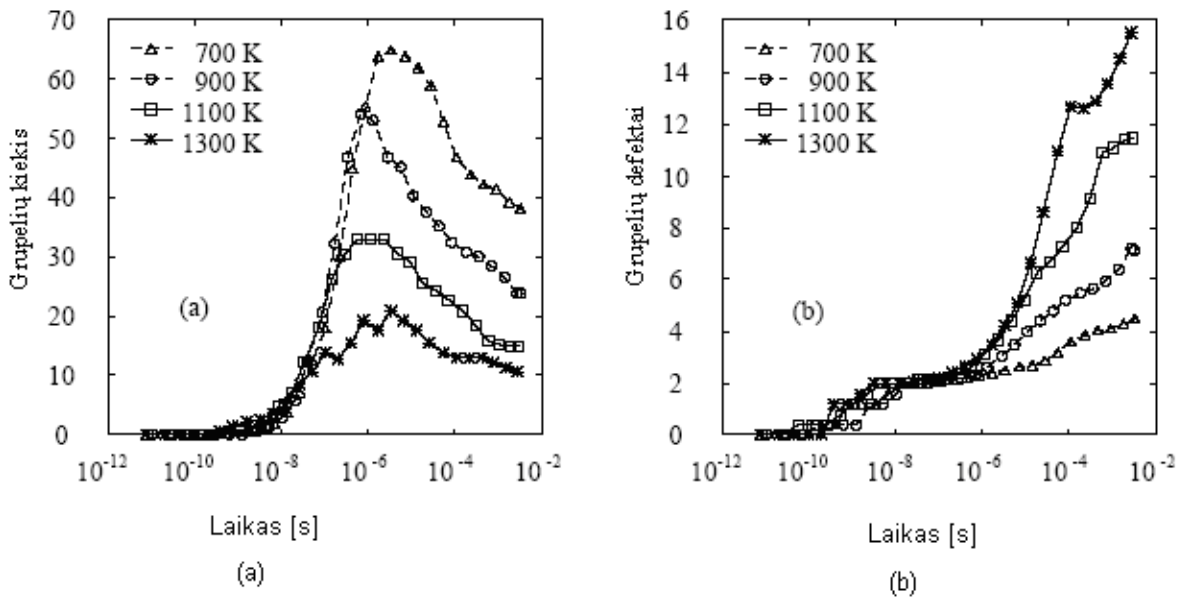


9 pav. vakansijos grupuojasi silicio gardelėse KLMC vaizdavime. Silicio atomai neparodyti.

10 pav. parodo vakansijų difuziją, kai temperatūra buvo keista nuo 700 K iki 1300 K. Pastovus difuzinis konstantos periodas parodo laisvų vakansijų difuziją. Difuzija didesnė aukštoje temperatūroje. Vakansijų grupelių susidarymą tam tikru laiku galima pamatyti pav. 11 a. Grupelės, kurios susiformuoja aukštesnėje temperatūroje, yra didesnės, negu tos, kurios susiformuoja žemesnėje temperatūroje, kaip matyti pav. 11 b. Keitimasis grupelių kiekyje - tai ne priežastis didesnių grupelių formavimuisi aukštose temperatūrose.

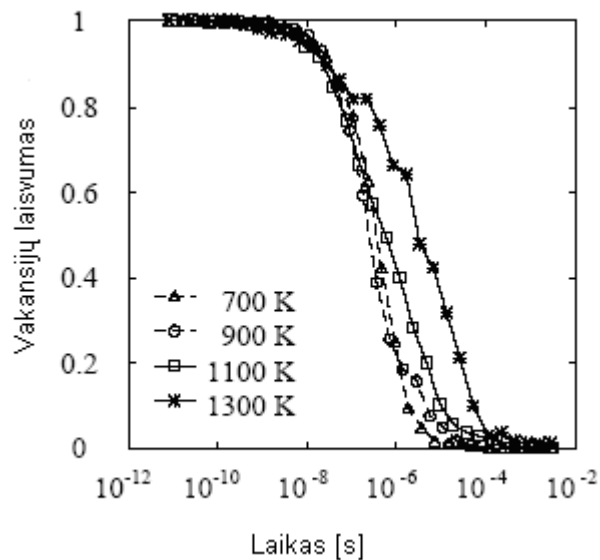


10 pav. vakansijos difunduoja įvairiose temperatūrose, kai koncentracija -  $10^{18} \text{ V cm}^{-3}$



**11 pav.** Grupelių kiekis (a) ir grupelių defektai (b) įvairiose temperatūrose, kai koncentracija yra  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$

Pav. 12 parodo laisvas vakansijas tam tikru laiku įvairiose temperatūrose. Laiko intervale grupelių kiekis mažėja ir vidutiniškas grupelės dydis auga. Dauguma vakansijų gali būti laisvos, nesijungia į grupes aukštoje temperatūroje. Taigi, kol didesnių grupelių augimas iš dalies numatytas visose temperatūrose, iš mažesnių grupelių sąveikos ir iš dalies laisvų vakansijų grupelių egzistavimo, pastarasis efektas daugiau duoda aukštesse temperatūrose.

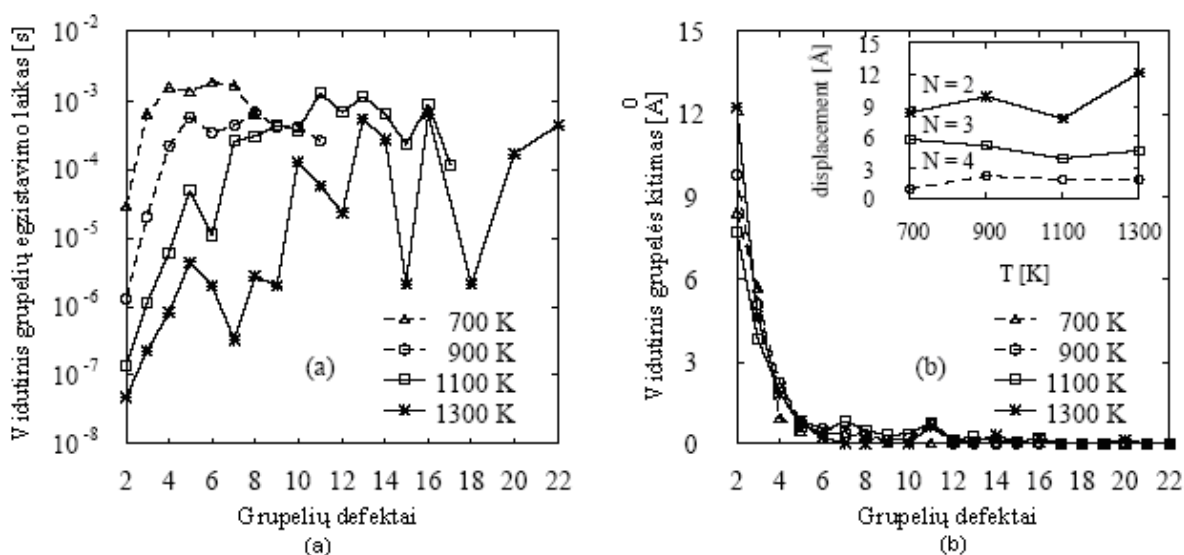


**12 pav.** Vakansijos laisvos įvairiose temperatūrose.

Vidutinis grupelių egzistavimo laikas, priklauso nuo kiekvieno grupelės dydžio per tam tikrą laiką, kurioje grupelės susideda iš daugelio defektų, taip pat priklauso nuo temperatūros. Pav. 13 a, parodo, kad egzistavimo laikas grupelių žemose temperatūrose yra



didesnis negu grupelių tokio pat dydžio aukštose temperatūrose. Šiluminiai svyravimai padidina vakansijos laisvumą, nutrūkimą nuo grupelės. Tikros grupelės dydis turi vidutiniškai ilgesnį egzistavimo laiką negu šios su panašiu vakansijos kiekiu. Grupelė su 5, 10, 13 ir 16 vakansijomis egzistuoja vidutiniškai ilgiau negu grupelės su vienu daugiau arba nedaug vakansijų, ypač aukštose temperatūrose. Pav. 13 b parodo vidutinį grupelės pakeitimą. Kaip tikėta, mažesnės grupelės vidutiniškai judresnės, bet paveiksle parodyta, kad vidutinis perkėlimas iš trijų mažiausių grupių, su 2, 3 ir 4 vakansijomis, žymiai nepakeičia temperatūrų diapazoną. Iš rezultatų pav. 11, 12 ir 13 didelių grupelių augimas tęsiasi skirtingais mechanizmais žemesnėse temperatūrose, negu aukštose temperatūrose. Poros pasilieka apribojamos reliatyviai ilgiems laikams, per kuriuos jie susirenka į didesnes grupes. Sąveikos greitis reliatyviai lėtas, nes difuzija vakansijų porų lėta negu difuzija laisvų vakansijų.

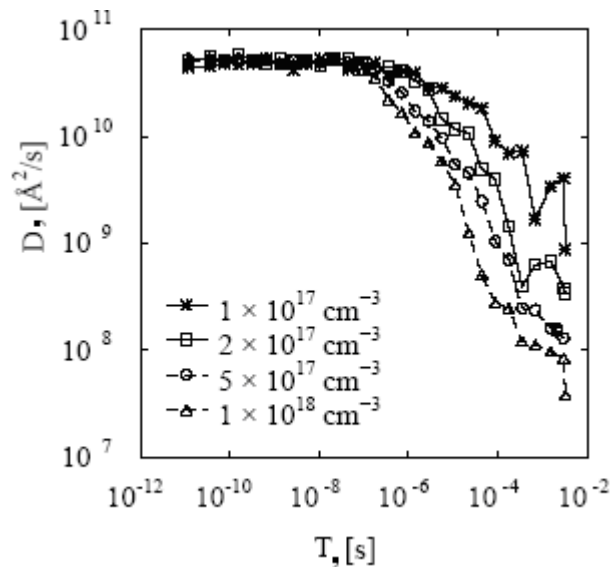


13 pav. Vidutinis grupelių egzistavimo laikas (a) ir vidutinis grupelės kitimas (b) įvairiose temperatūrose.

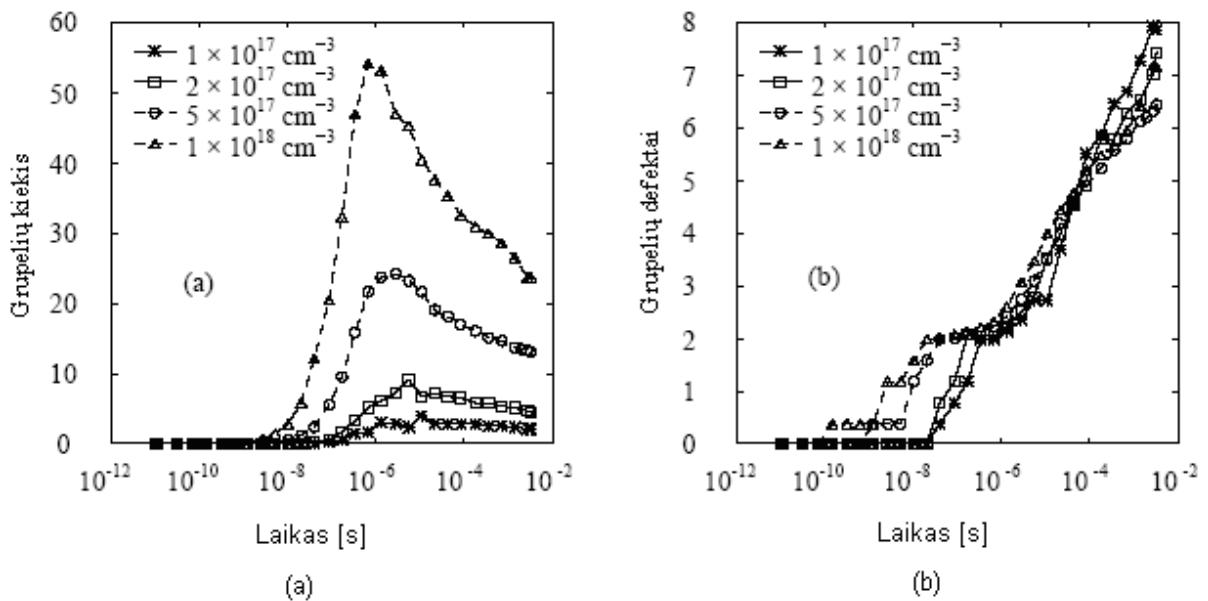
Aukštesnėje temperatūroje vakansijų poros iš pradžių šiek tiek formuojasi, bet dauguma vakansijų vis dar lieka laisvos. Poras galima atskirti reformuojant naujas vakansijų poras. Taigi aukštose temperatūrose didelių grupelių susidarymas yra derinys iš sudarytų mažų grupelių ir sugautų laisvų vakansijų. Laisvų vakansijų difuzija greita, taip didesnės grupelės gali formotis greitai aukštoje temperatūroje. Skirtingas vakansijų grupavimasis žemesnėse ir aukštesnėse temperatūrose gali būti svarbus, jei vakansijos naudojamos kontroliuoti kitos rūšies difuziją.

Vakansijų grupelių susidarymas, kai vakansijos koncentracija svyruoja nuo  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  iki  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  ir sistemos temperatūra 900 K. 14 pav. parodo vakansijos difuziją tam tikru laiku. Grupelių susidarymas matomas pav. 15 a, žemoje koncentracijoje grupelių kiekis labai

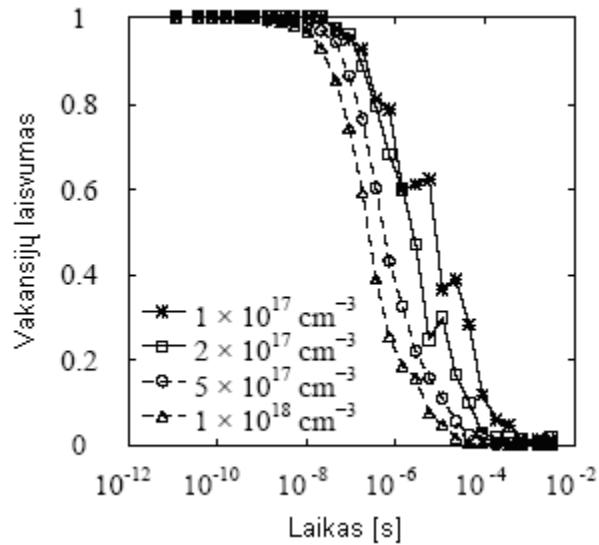
lėtai didėja, kol aukštesnės koncentracijos formuoja didelių grupelių kieki, po kurio vėl sumažėja grupelių kiekis. Pav. 15 b parodo grupes, kurios pradžioje formuojasi visose koncentracijose, vakansijų poros jungiasi ir tada, kai vidutinės grupelės didėja apytikriai tuo pačiu tempu. Skirtumas grupelių augime tarp žemos ir aukštos koncentracijos gali būti laisvų vakansijų kiekis sistemoje. Pav. 16 parodo didesnių vakansijų komponentų svyravimą grupelėse aukštoje koncentracijoje. Grupelės turi ilgesnius egzistavimo laikus 900 K temperatūroje, negu aukštoje temperatūroje. Taigi grupelių augimas aukštoje koncentracijoje gali atitikti mažesnių grupelių sąveiką, kol žemesnių koncentracijų grupelių kiekis pasiekia reliatyviai pastovus, kol vidutinis dydis didėja ir laisvų vakansijų kiekis mažėja. Tai reiškia, kad laisvų vakansijų užgrobimas valdo grupelės augimą žemesnėse koncentracijose.



14 pav. Vakansijų difuzija skirtingose koncentracijose, kai temperatūra 900 K.

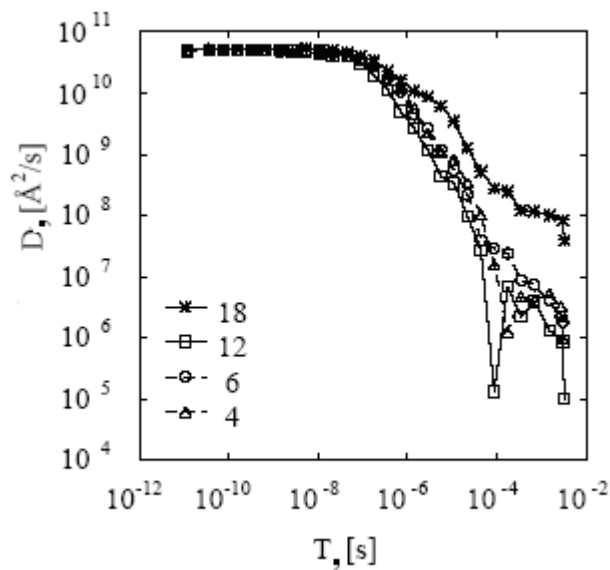


15 pav. Grupelių kiekis (a) ir grupelių defektai (b) įvairiose koncentracijose, kai temperatūra 900 K.

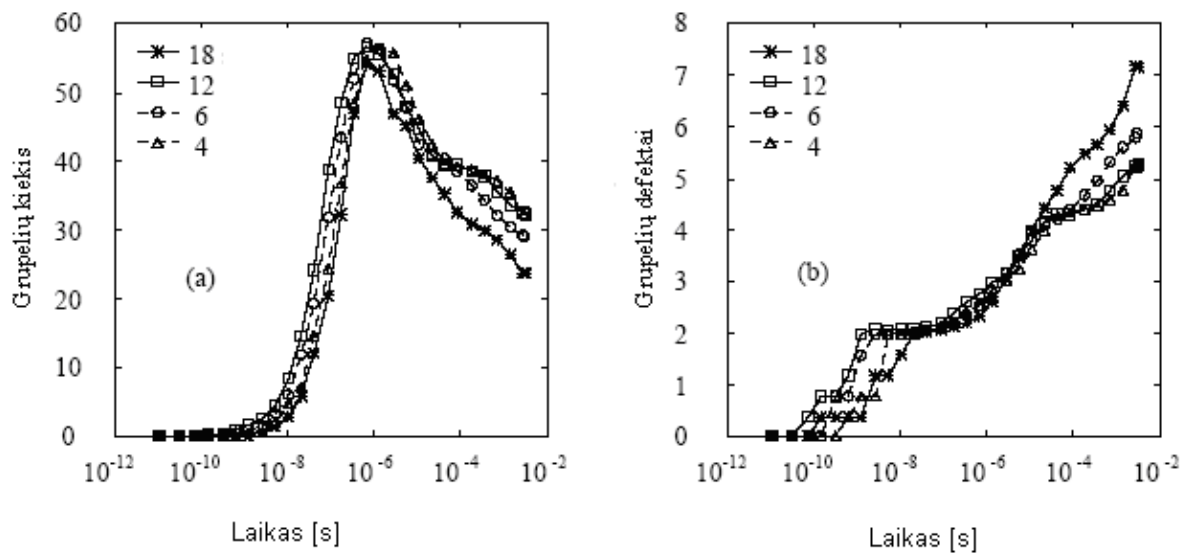


16 pav. Vakansijų komponentė laisva įvairiose koncentracijose, kai temperatūra 900 K

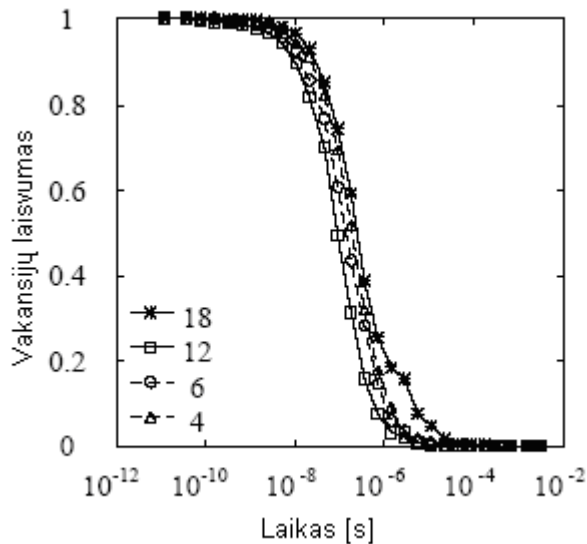
Pav. 17 parodyta vakansijų difuzija tam tikru laiku. Pradžioje laikoma vakansijų difuzija laisva iš visų sąveikos diapazonų. Kai grupelės formuojasi, difuzija mažėja. Grupelės kiekis ir grupelių defektai parodyti pav. 18 a ir b. Juose parodytas nežymus skirtumas ilgesniame ir trumpesniame sąveikos diapazone. Ilgesnis sąveikos diapazonas nežymiai didėja, nedaug susikuria grupelių. Pav. 19 parodytas vakansijų laisvumas, kuris panašus kaip ir sąveikos diapazone. Iš šių kreivių galima matyti, jog ilgesnės sąveikos diapazonas linksta link didesnės vakansijų difuzijos, kurio rezultatas yra keletas grupelių.



17 pav. Vakansijų difuzija įvairiuose sąveikos diapazone, kai koncentracija  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  ir temperatūra – 900 K



**18 pav.** Grupelių kiekis (a) ir grupelių defektai (b) sąveikos diapazonuose, kai koncentracija –  $1018 \text{ cm}^{-3}$ , temperatūra – 900 K



**19 pav.** Vakansijų komponentė laisva įvairiose sąveikos diapazonuose, kai koncentracija –  $1018 \text{ cm}^{-3}$ , temperatūra – 900 K

Ištirtas vakansijų grupavimasis, kai kinta temperatūra, koncentracija, ir sąveikos diapazonas, laikant defektus atsitiktinėje sekoje. Aukštesnėje temperatūroje susidaro nedidelis kiekis vakansijų grupelių, bet jos yra didesnės ir egzistuoja trumpiau, negu grupelės, kurios susiformuoja žemesnėje temperatūroje ir kurios auga pritraukdamos laisvas vakansijas. Žemesnėje temperatūroje grupelės auga atsiribodamos ir sąveikaujant mažesnėms grupelėms. Aukštesnės koncentracijos vakansijos formuoja daugiau grupelių negu mažesnės koncentracijos su mažai laisvomis vakansijomis, bet vidutinis grupelių dydis nepriklauso nuo koncentracijos. Ilgesnės sąveikos leidžia greitesnę difuziją su keletu grupelių. Vakansijų difuzijos priklausomybė nuo laiko, pagal šį dėsnį  $D(t) \sim t^{-\gamma}$ . Kai sąveikos diapazonas buvo

ilgas, su augančia koncentracija, pastovia temperatūros konstanta, tai sumažino temperatūrą nustatytoje koncentracijoje. Trumpesnės sąveikos diapazonas duoda didesnę vertę. Buvo pateikta vakansijos grupelių kiekio ir dydžio priklausomybė nuo laiko, temperatūros ir koncentracijos. [11]

### 3. SI KRISTALO DIFUZIJOS PARAMETRŲ SKAIČIAVIMAS

#### 3.1 Vakansijų sužadintų rentgeno spinduliais 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 šiolei 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 įsisotinimo laikui, 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 generacijai Si kristalų paviršiuje yra naudojami minkšti rentgeno spinduliai. Vakansijos Si elgiasi kaip vienąkart neigiami ir dukart neigiami akceptoriai, kurie padidina p-tipo mėginio laidumą (Janavičius ir kt., 2002). Aukštos varžos 667  $\Omega$  cm p-Si (legiruotu su boru) mėginiai, kurių išmatavimai 3,33x3,06x3,09 mm<sup>3</sup> buvo apšvitinti rentgenu. Dėl Ožė efekto atsiradusios neigiamos vakansijos migracijos metu kristale elgiasi kaip akceptoriai ir padidina elektrinį laidumą. Galima išreikšti maksimalaus vakansijų įsiskverbimo gylį dydžiu  $x_0$  difuzijos kristale prisotinimo laiku  $t_0$

$$x_0 = 1,615\sqrt{D_v t_0}, \quad (23)$$

kur vakansijų difuzijos koeficientas  $D_v$  gali būti išreikštas kita formule:

$$D_v = D_0 e^{-\Delta H_m / kT}. \quad (24)$$

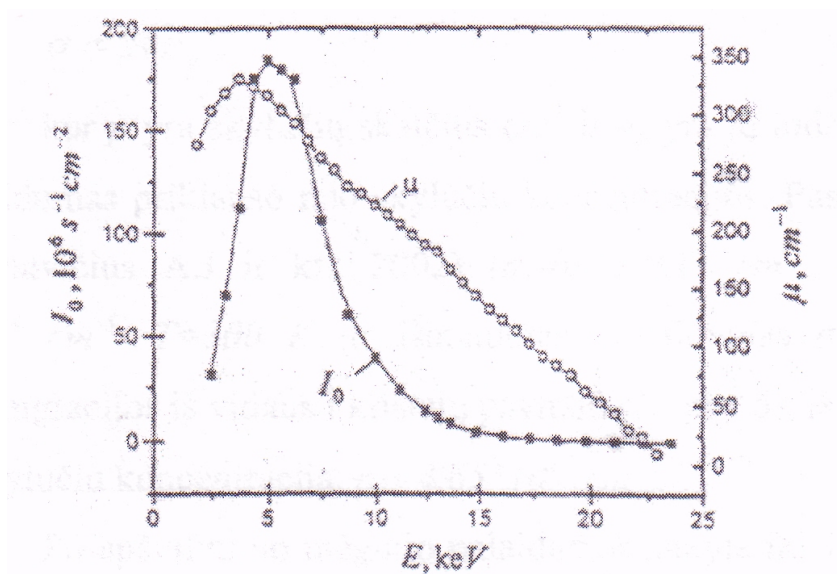
Čia  $D_0$  – eksponentinis koeficientas ir  $\Delta H_m$  yra vakansijų judėjimo entalpija. Tam, kad būtų generuotos neigiamos, teigiamos ir neutralios vakansijos sužadintame kristale, buvo panaudota rentgeno spinduliuotė, gaunama naudojant lempą su vario anodu. Rentgeno spindulių intensyvumo eksponentinis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

$$I_B(E) = I_0(E) e^{-\mu(E)x} \quad (25)$$

Absorbcijos koeficientas  $\mu(E)$  buvo nustatytas išmatuojant rentgeno 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 20 pav. Gauti rezultatai gali būti patikrinti naudojant teorines formules rentgeno absorbcijos koeficientui  $\mu$ :

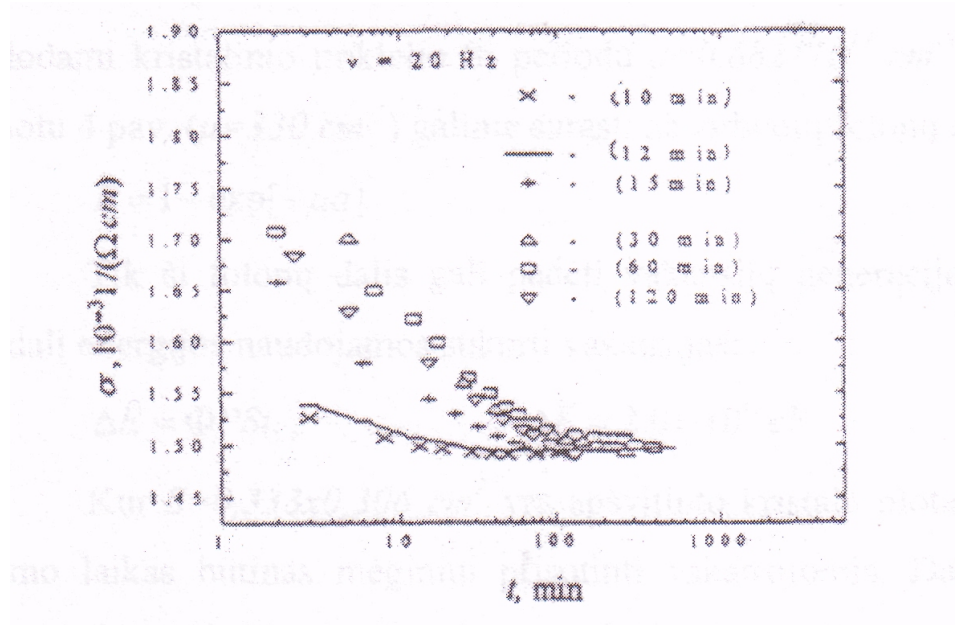
$$\sigma_f = \frac{CZ^k}{(\hbar\omega)^n}, \quad \mu = n_0 \sigma_f, \quad (26)$$

kur  $C$  yra konstanta,  $k=4$ ,  $n=3.5$  rentgeno, 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  $K_\alpha$  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 20 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  $d=3.09 \text{ mm}$ .



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

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



21 pav. Laidumo priklausomybė nuo laiko

Indukuotas laidumas  $\sigma_w$  buvo apskaičiuotas Hewlett – Parked (4284 A 20 Hz-1 MHz) dažnio diapozonu nuo 20 Hz iki 1 MHz. Laidumas buvo apskaičiuotas iš formulės:

$$\sigma_w = \sigma + A\omega^s.$$

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. Keisdami apšvitinimo periodus radome pavyzdžių prisotinimo laiką su atskirai sužadintomis aukšto judrumo vakansijomis. Matome, kad prisotinimo laikas  $t_s = 15 \text{ min}$  negali būti matuojamas dideliu tikslumu, ir šis faktas mažina visų matavimų tikslumą.

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

$$\sigma = pe\mu_p \quad (27)$$

čia  $p$  - skylių skaičius  $\text{cm}^3$  ir  $\mu_p$  - jų judrumas. Duotoje temperatūroje judrumas priklauso nuo skylių koncentracijos. Pasinaudodami  $\sigma_1$  ir  $p_1$  įvertiname duotas ( $\sigma_1 = 0.01 \text{ } \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$ , boro akceptorių 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 (žr. pav.21), iš (27) 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  $\Delta p_2$  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:

$$N_v = \Delta p_2 V, \quad N_v = 2.13 \cdot 10^{11} \quad (28)$$

Parinkta rentgeno lempos anodinė įtampa 22 kV, anodinė srovė - 15  $\mu\text{A}$ . 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 paviršiuje yra  $N = 6,8 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ . Pasinaudodami kristalinio tinklelio Si periodu  $a = 0,543 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$  ir absorbcijos koeficientu 20 pav. ( $\mu = 330 \text{ cm}^{-1}$ ), galime surasti absorbuotų fotonų dalį sluoksnio paviršiuje:

$$P = 1 - \exp[-\mu a]. \quad (29)$$

Tik ši fotonų dalis gali padėti vakansijų generaciją. Dabar galima apytiksliai įvertinti dalį energijos, kurios naudojamos sukurti vakansijas:

$$\Delta E = \Phi P S t_1, \quad \Delta E = 2.01 \cdot 10^{11} \text{ eV} \quad (30)$$

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 (28) ir (30) rezultatų galima rasti vienos neigiamos sužadintos vakansijos susiformavimo energiją  $\Delta E / N_v = 0,946 \text{ eV}$ . Vakansijų skaičius įvestas į mėginį gali būti išreikštas pasinaudojant formule, atomų priemaišų skaičiaus įvestų difuzijos procese:

$$N_v = 0.549 N_{sl} x_{01}, \quad N_{sl} = 0.5 n_{vs} \quad (31)$$

Čia  $N_{vs}=2,51 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-1}$  yra vakansijų koncentracija apšvitinto paviršiaus pusėje, tiksliai iš jų pusė 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 įsiskverbimo gyliui.  $D_v$  yra vakansijų difuzijos koeficientas ir  $t_1$  yra pavyzdžio prisotinimo vakansijomis laikas. Iš 21 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)

$$D_v=5.30 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} \quad (32)$$

Iš 21 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 stadijos. 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:

$$\frac{N_{s2}}{N_{vc}} = \frac{(D_v t_1)^{1/3}}{(D t_1 + D_s t)^{1/3}} \quad (33)$$

Turime atkreipti dėmesį

$$\frac{N_{s2}}{N_{vc}} = \frac{0.5 p_2}{p_2 + 1 p_1} \quad (34)$$

iš (29) ir (31) rezultatų gautas laikas  $t=166 \text{ min}$ , būtinas vakansijų pasišalinimui iš pavyzdžio. Palygindami šį rezultatą su 21 pav. ir 2 lentele, galime matyti, kad šis rezultatas sutampa su eksperimentiniu.

Elektrinis laidumas  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  Si pavyzdyje apšvitinus rentgeno spinduliais radiacijos periodais  $t_1 = 12$  min,  $t_2 = 15$  min, and  $t_3 = 60$  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

Pasinaudodami Si atomo žinoma koncentracija  $5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  ir (31) rezultatu, galime surasti vieną kartą neigiamų vakansijų reliatyvią koncentraciją  $N_r = 1,35 \cdot 10^{-10}$ . Tada pasinaudodami žinoma lygybe:

$$D = D_v N_r \quad (35)$$

rasas savidifuzijos koeficientas  $7.15 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$  Si kristale kambario temperatūroje.

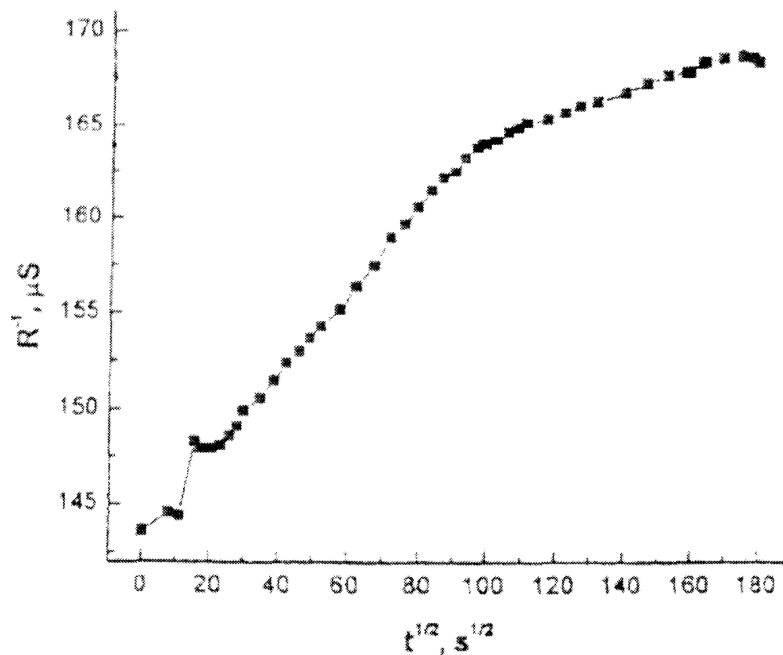
Gautas rezultatas gali būti palygintas su difuzijos koeficientu  $D_{1v} = 1,48 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$  ir  $D_{2v} = 7.28 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$  išdėstyame temperatūroms  $T_1 = 160 \text{ K}$  ir  $T_2 = 1685 \text{ K}$ . Rezultatas  $D_v = 5.30 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  sužadintoms vakansijoms gautas su dideliu tikslumu ir yra arti  $D_2$  rezultato. 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  $\Delta H_m$  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 atvejuje 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.

### 3.2 Si kristalų elektrinis laidumas ir terminiu būdu generuotų vakansijų difuzijos koeficientas

Pasinaudodami elektrinio laidumo priklausomybe nuo laiko ir Holo judrumo dydžių rezultatais galime nagrinėti vakansijų judrumą (Purlis ir kt., 2001). Vakansijų, kaip donorų, arba akceptorių 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.

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

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 - Ožė efektas. Jie laužo cheminius ryšius Si mėginio paviršiniuose atomuose ir taip susidaro galimybė nutrūkti tokiam ryšių skaičiui, kuris yra būtinas vakansijai susidaryti. Tarpiniai atomai negali būti sukurti rentgeno, nes Si atomų išlaisvinimo energija  $15,8 \text{ keV}$  pakankamai aukšta.



22 Pav. Laidumo priklausomybė nuo švitinimo laiko

Iš eksperimentiškai išmatuotos savitojo laidumo  $1/R$  (22 pav. ) priklausomybės nuo laiko galime gauti mėginio su vakansijomis prisotinimo laiką  $t_s$ . Pavyzdys prisotintas su vienąkart neigiamomis dviejų tipų vakansijomis su dideliu judrumu. Išnagrinėjant savitojo laidumo priklausomybę  $\sqrt{t_s}$ , parodyta pav.22, 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  $t_{s_2}=415$  min., su lėtomis dukart neigiamomis vakansijomis.

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

$$\sigma_1 = p_1 e \mu_p \quad (36)$$

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

$$\sigma_2 = p_2 e \mu_p \quad (37)$$

Tada pasinaudojus žinomu laidumu (A.J.Janavičius, 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  $1/R$  pateiktų pav. 22, iš nešvitinto Si mėginio formulių (36) ir (37) 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  $1/R=\mu\text{s}$ . Tarkime, kad savitojo laidumo padidėjimas proporcingas papildomų skylių koncentracijai, sukurtai vienąkart neigiamomis  $\Delta p^s$  (po apšvitinimo laiko  $t_{s1} = 200$  min) ir dukart neigiamomis  $\Delta p_{--}$  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:

$$\frac{\Delta \sigma_2}{\Delta \sigma^s} = \frac{\Delta p^s + \Delta p_{--}}{\Delta p^s + \Delta p_{--}^s} \quad (38)$$

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 vieną kart neigiamomis vakansijomis. Tada iš paskutinio išreiškimo turime:

$$\Delta p_{-}^s + \Delta p_{--}^s = 0.825 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}, \quad (39)$$

$$\Delta p_{-}^s + \Delta p_{--}^s = 0.66 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}. \quad (40)$$

Iš formulės (37) rezultatų randamas:

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

ir po išspręstos sistemos (33), (34) gaunamas:

$$\Delta p_{-}^s = 0.286 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}, \quad \Delta p_{--}^s = 0.539 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}. \quad (41)$$

Apšvitinus, Si mėginį 0.309, iš šono  $0.33 \times 0.306 \text{ cm}^2$ . Galima gauti sukurtų vieną kart neigiamų vakansijų skaičių  $\Delta N_{-}$  ir dukart neigiamų vakansijų skaičių  $\Delta N_{--}$ , kaip:

$$\Delta N_{-} = \Delta p_{-}^s V, \quad \Delta N_{-} = 0.9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}, \quad (42)$$

$$\Delta N_{--} = \frac{1}{2} \Delta p_{--}^s V, \quad \Delta N_{--} = 1.7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}. \quad (43)$$

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

$$\Delta N_v = 0.5492 N_{s1} x_{01}, \quad N_{s1} = 0.5 N_{vs},$$

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  $t_l$  prisotinto vakansijomis mėginio laikas. Iš pav. 22 ir skaičiavimo

rezultatų mes galime matyti, kad švitinimo laikas prisotinto mėginio su atskirai sužadintomis vakansijomis įgyja  $t_1 = 200$  min ir su dvigubai sužadintomis vakansijomis  $t_2 = 415$  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), kaip:

$$D_{-} = 3.05 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{s}, \quad D_{--} = 1.47 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 / \text{s}. \quad (44)$$

Galime palyginti rezultatus su difuzijos vakansijų koeficientu išreiškimu silicyje, gautų iš žemų ir aukštų temperatūrų eksperimente:

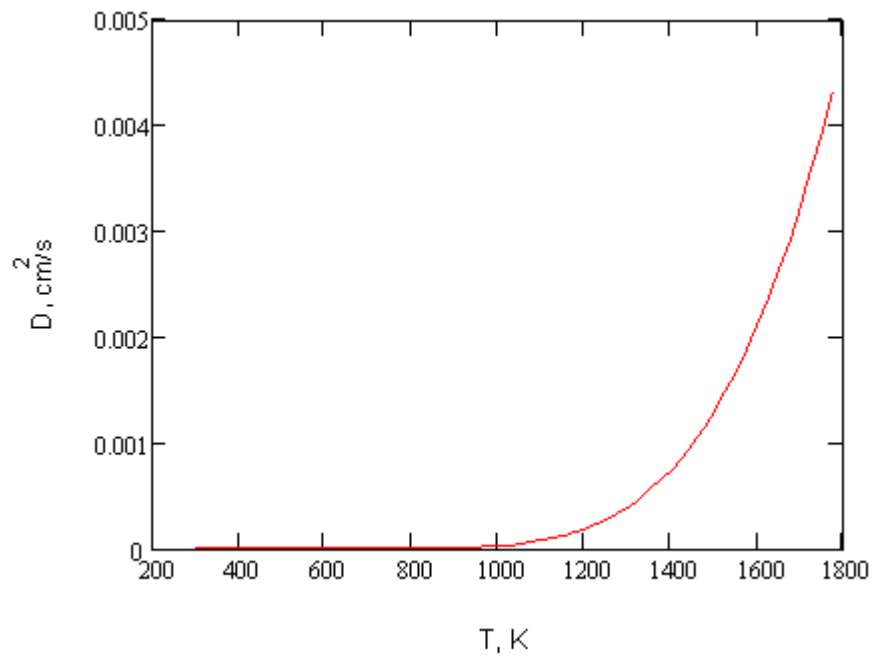
$$D_v = 3 \exp[-(1.0 \text{ eV})/kT] + 10^{-6} \exp[-(0.2 \text{ eV})/kT] \text{ cm}^2 / \text{s}. \quad (45)$$

Iš šios formulės galima rasti difuzijos koeficiento priklausomybę nuo temperatūros (parodyta 3 lentelėje, pav. 23).

3 lentelė

<b>Vakansijų difuzijos koeficientas prie skirtingų temperatūrų</b>							
<b>T, K</b>	300	350	525	675	750	850	925
<b>D<sub>v</sub>, cm<sup>2</sup>/s</b>	$4.355 \cdot 10^{-10}$	$1.316 \cdot 10^{-9}$	$1.275 \cdot 10^{-8}$	$1.34 \cdot 10^{-7}$	$3.742 \cdot 10^{-7}$	$3.579 \cdot 10^{-6}$	$1.072 \cdot 10^{-5}$

Mes apskaičiavome difuzijos koeficientus prie įvairių temperatūrų tam, kad galėtume palyginti su mūsų rastais koeficientais matuojant elektrinį pavyzdėlio laidumą, paveiktą rentgeno spinduliais. Iš formulės (45) gaunamas vakansijų difuzijos koeficientas kambario temperatūroje:  $D_v = 4.4 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$ . Gautas rezultatas gali būti palygintas su difuzijos koeficientu gautu dėl Ožė efekto kambario temperatūroje  $D_v = 3.05 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$ . Metastabilios vakansijos gautos dėl Ožė efekto yra žymiai greitesnės.



**23 pav.** Vakansijų difuzijos koeficiento priklausomybė nuo temperatūros



## IŠVADOS

1. Vakansijų difuzija priklauso nuo temperatūros, koncentracijos ir sąveikos diapazono.
2. Apskaičiavus difuzijos koeficientą generuotoms vakansijoms terminiu būdu  $D_v=3.579 \cdot 10^{-6}$ , paaiškėjo, kad šis koeficientas prie 850 K yra lygus vakansijų difuzijos koeficientui, generuotų rentgeno spinduliais. Tokiu būdu matome, kad metastabilios vakansijos gautos dėl Ožė efekto yra žymiai greitesnės.
3. Difuzijos koeficientas gautas terminiu būdu ir atšaldytas iki kambario temperatūros lygus  $D_v=4.4 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$ , o difuzijos koeficientas gautas dėl Ožė efekto kambario temperatūroje lygus  $D_v=3.05 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$ .
4. Vakansijoms silicio monokristalo paviršiuje generuoti panaudota rentgeno spinduliuotė. Teigiamai ir neigiamai įkrautos vakansijos, elgiasi kaip donorai ir akceptorai, padidindamos kristalo elektrinį laidumą.
5. Apšvitinus rentgeno spinduliais, Si pasižymi geromis difuzijos savybėmis kambario temperatūroje, ir tai sudaro galimybę kurti aukštos kokybės mikroelektronikos įrenginius.

## LITERATŪRA

1. Dargys A., Kundrotas J. Fizinių Ge, Si, GaAs ir InP savybių vadovėlis. Vilnius, 1994.
2. Glickman M.E., Diffusion in Solids (Wiley-Interscience, New York, 2000).
3. Janavičius A.J., Banys J., Purlys R., Balakauskas S. The diffusion coefficient of vacancies excited by X-ray in monocrystalline Si. //Lithuanian journal of physics. No.5, 337-340. 2002.
4. Janavičius A.J. The nonlinear diffusion in the nonisothermal case . //Acta physica Polonica A. Vol.93. No.3. 1998.
5. Janavičius A.J. Atsitiktiniai procesai ir pernešimo reiškinių lygtys. Šiauliai, 2002.
6. Kvedaravičius A., Navickas R. Silicio integrinių schemų gamybos vadovas. Vilnius, 1989.
7. Naujokaitis R., Klimašauskas K., Domkus M., Pranevičius L. Integralinių schemų technologijos pagrindai Puslaidininkinės medžiagos. Difuzija. Vilnius, 1983.
8. 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. No.4-6, 376-380. 2001.
9. Štaras S., Kirvaitis R. Mikroelektronikos pagrindai. Vilnius, 1995.
10. Purlys R., Janavičius A.J., Mekys A., Storasta J. Electrical conductivity of Si and GaAs monocrystals excited by soft X-ray. //Lithuanian journal of physics. No.4-6, 376-380. 2001.
11. Benjamin P. Haley. (2006). Vacansy clustering and diffusion in silicon: Kinetic lattice Monte. [žiūrėta 2007-03-25]. //Prieiga per internetą: [http://scitation.aip.org/journals/entry/spin\\_login.jsp](http://scitation.aip.org/journals/entry/spin_login.jsp).