

ВОЛИНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ім. ЛЕСІ УКРАЇНКИ

Коровицький Андрій Михайлович

УДК 621. 315. 592

**КІНЕТИЧНІ ЕФЕКТИ У ТВЕРДИХ РОЗЧИНАХ
КРЕМНІЙ-ГЕРМАНІЙ**

01. 04. 10 – фізика напівпровідників і діелектриків

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Луцьк – 2002

Дисертацією є рукопис

Робота виконана у Луцькому державному технічному університеті,

Міністерство освіти та науки України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор **Семенюк Анатолій Костянтинович** Луцький державний технічний університет, професор кафедри фізики.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор **Шендеровський Василь Андрійович** Інститут фізики НАН України, провідний науковий співробітник; кандидат фізико-математичних наук, доцент **Доскоч Василь Петрович** Волинський державний університет ім. Лесі Українки, доцент кафедри фізики твердого тіла.

Провідна установа: Інститут фізики напівпровідників НАН України, м. Київ.

Захист відбудеться “ 12 ” квітня 2002р. о 14 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради

К.32.051.01 при Волинському державному університеті ім. Лесі Українки за адресою м. Луцьк, вул. Потапова, 9.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Волинського державного університету ім. Лесі Українки за адресою м. Луцьк, вул. Винниченка, 30.

Автореферат розісланий 11.03.2002р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради

Божко В.В.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Напівпровідникові системи, які називаються твердими розчинами, давно знаходяться в чільному полі зору дослідників, оскільки варіювання складом кристала дозволяє плавно змінювати його фундаментальні параметри: постійну ґратки, ширину забороненої зони, оптичні, електричні характеристики. Поряд із важливими для опто- і мікроелектроніки змішаними кристалами напівпровідникових сполук останнім часом зростає інтерес до вивчення властивостей твердих розчинів кремній-германій, компоненти якого є основними промисловими матеріалами напівпровідникової електроніки. Необхідність детального вивчення властивостей твердих розчинів Si<Ge> зумовлена рядом важливих факторів. По-перше, тверді розчини кремній-германій є добрими модельними об'єктами для дослідження впливу зміни зонної структури, неоднорідностей та розмірних ефектів на властивості речовини. По-друге, Si<Ge> є базовою сировиною для створення надвисокочастотних приладів, пристроїв на поверхнево-акустичних хвилях, приймачів випромінювання для волоконно-оптичних ліній зв'язку, тощо. По-третє, прилади, виготовлені на основі Si<Ge>, мають значні переваги (висока швидкодія, низький рівень шумів, можливість досягнення високих робочих частот від двох до десятків ГГц, низька собівартість) над приладами на основі Si і, в ряді випадків, GaAs. По-четверте, Si<Ge> є перспективним матеріалом для створення приладів із підвищеною радіаційною стійкістю.

Найбільш характерні особливості фізичних властивостей напів-провідників визначаються симетрією кристалічної ґратки та специфікою міжатомної взаємодії. Застосування направлених деформаційних впливів на кристали, які зумовлюють зміну не тільки міжатомних відстаней, але й симетрії ґратки, призводить до найбільш суттєвих змін електронної підсистеми в багатодолинних напівпровідниках. Тому дослідження тензоефектів у напівпровідникових кристалах високої симетрії має важливе значення як у науковому, так і прикладному аспектах. Висока інформативність методу дозволяє з достатньою достовірністю вивчати особливості зонної структури багатодолинних напівпровідників, коректно визначати її параметри та величини, які характеризують механізми розсіяння носіїв заряду.

Особливе місце у фізиці напівпровідників належить вивченню кінетичних ефектів, які в значній мірі визначаються механізмами розсіяння носіїв струму. Тому дослідження величин, що характеризують ці процеси, дозволяє не лише вивчати, але й прогнозувати електричні та гальваномагнітні властивості кристала.

При масовому виробництві приладів напівпровідникової електроніки задовольнити сучасні вимоги відтворюваності й стабільності їх характеристик можна тільки, використовуючи матеріали з високою однорідністю. Це особливо важливо в мікроелектроніці та при виготовленні приладів значної площі, таких, як силові вентиляти, тиристори, інтегральні мікросхеми. В останнє десятиріччя стало зрозумілим, що подальше підвищення густини

інтегральних мікросхем, їх надійності й економічності, очевидно, вже не може бути здійснено тільки за рахунок удосконалення технології виробництва, а обмежується мікронеоднорідностями фізико-хімічних властивостей напівпровідникових матеріалів. Тому проблема дослідження неоднорідностей взагалі й, зокрема, при радіаційних впливах була і залишається актуальною.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дослідження твердих розчинів кремній-германій безпосередньо пов'язане з державними науковими програмами і, зокрема, науковими планами кафедри фізики Луцького державного технічного університету. Базовою для підготовки й подання дисертаційної роботи була науково-дослідна робота на тему “Дослідження радіаційних дефектів у кристалах кремнію й твердих розчинах кремній-германій”, № державної реєстрації 0198У000265.

Мета і завдання дослідження. Мета роботи: з'ясувати природу кінетичних ефектів у кристалах п-кремнію з ізовалентною домішкою (ІВД) германію.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі задачі:

- дослідити тензорезистивний ефект у кристалах твердих розчинів $\text{Si} \langle \text{Ge} \rangle$ при одновісних пружних деформаціях та коректно визначити константу деформаційного потенціалу (Ξ_U), параметри анізотропії рухливості (K) та анізотропії часів релаксації носіїв струму (K_τ), перпендикулярну ($\mu_\perp$) та поздовжню ($\mu_\parallel$) складові рухливостей носіїв струму в окремо взятому ізоенергетичному еліпсоїді;
- встановити вплив ізовалентної домішки германію на інтенсивність утворення дефекту радіаційного походження А-центра (асоціація вакансії й атома кисню) та його специфіку;
- змодельовати потенціал ізовалентної домішки та встановити температурні закономірності розсіяння при наявності ІВД у кристалах п-кремнію;
- дослідити наявність неоднорідних областей у кристалах твердих розчинів кремній-германій і оцінити їх основні параметри.

При вирішенні поставлених задач використовувався один із найбільш ефективних методів – метод дослідження тензоефектів при одновісній пружній деформації. Сукупність отриманих на даний час результатів дає право розглядати його у поєднанні з результатами вимірювань ефекту Холла та електропровідності, як найбільш інформативний та наглядний метод для дослідження зонної структури, коректного визначення її параметрів та величин, які характеризують механізми розсіяння.

Наукова новизна одержаних результатів.

1. Досліджено тензорезистивний ефект у кристалах твердих розчинів кремній-германій з концентрацією неосновної компоненти Ge від $2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ до $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. При цьому встановлено, що введення в кристал кремнію ізовалентної домішки германію приводить до зменшення ефекту п'єзоопору в області насичення; з ростом концентрації ізовалентної домішки змінюються відповідні анізотропні параметри; чутливим параметром щодо наявності ізовалентної домішки є перпендикулярна складова рухливості електронів ($\mu_\perp$); константа деформаційного потенціалу (Ξ_U) для концентрацій $N_{\text{Ge}} < 7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ не змінюється.
2. Встановлено, що ізовалентна домішка германію практично не впливає на швидкість генерації А-центрів у кристалах кремнію, проте дослідження впливу сильних одновісних пружних деформацій на положення рівня А-центра в забороненій зоні твердих розчинів кремній-германій показало, що для напрямку [111] його реакція зовсім інша. Вперше виявлена релаксація п'єзоопору, яка зумовлена атомною переорієнтацією А-центрів.
3. Експериментально показано та теоретично обґрунтовано, що рухливість μ_{Ge} , яка характеризує розсіяння при наявності ІВД у кристалах п-кремнію, проявляє температурну залежність $\mu_{\text{Ge}} \sim T^{-0.5}$.

4. Показано, що у твердих розчинах Si<Ge> атоми ізовалентної домішки германію при концентраціях $N_{Ge} \geq 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ утворюють невеликі кластери, кількість атомів у яких змінюється в межах від 20 до 100; залежно від рівня легування ІВД ефективні значення геометричних розмірів таких неоднорідностей знаходяться в межах $20 \leq r \leq 200 \text{ \AA}$.

Практичне значення отриманих результатів.

1. На основі сучасних комп'ютерних технологій здійснено модернізацію установки для досліджень п'єзоопору кристалів при одновісній пружній деформації.
2. Вивчення тензоефектів у кристалах твердих розчинів кремній-германій дозволяє не лише визначати відповідні електрофізичні параметри, але й прогнозувати можливості щодо створення нових тензодатчиків.
3. Запропоновано методику визначення концентрації ізовалентної домішки, яка суттєво впливає на процеси перенесення заряду в твердих розчинах кремній-германій.
4. Показано, що кристали Si<Ge> є перспективним матеріалом для створення приладів із підвищеною радіаційною стійкістю.

Особистий внесок здобувача. Автор безпосередньо виконував усі експериментальні та теоретичні дослідження. Особисто розробляв та впроваджував окремі вузли вимірювальної установки. Одноосібно опублікував три статті та одні тези конференції. Усі висновки та положення, які складають суть дисертації, сформульовані автором особисто. Творчо обговорював з керівником постановку задачі і вибір найбільш ефективного шляху її виконання.

Апробація результатів дисертації. Результати досліджень, які представлені в дисертаційній роботі, доповідались та обговорювались на Міжнародній науковій конференції “Фізика в Україні” (Львів, 1995р.); на наукових семінарах кафедри фізики Луцького державного технічного університету; на Першому науковому симпозиумі “Сучасні проблеми інженерної механіки” (Луцьк, 2000р.); на 4th International modeling school of AMSE_UAPL (Crimea, 2000р.); на II Міжнародному Смакуловому симпозиумі “Фундаментальні і прикладні проблеми сучасної фізики” (Тернопіль, 2000р.); на наукових конференціях професорсько-викладацького складу Луцького державного технічного університету (1994-2001рр.); на об'єднаному науковому семінарі “Фізика напівпровідників та діелектриків” Волинського державного університету та Луцького державного технічного університету.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 17 друкованих праць, з них 5 – у фахових журналах.

Структура дисертації. Дисертація складається з вступу, чотирьох розділів, висновків та переліку використаної літератури. Загальний обсяг дисертаційної роботи становить 141 сторінку, з них 37 рисунків та одна таблиця. У роботі використано 182 бібліографічних посилання.

ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтована актуальність дисертаційної роботи, визначена її мета, основні завдання, наукова новизна та практичне значення. Приведено відомості про апробацію роботи, особистий внесок дисертанта, публікації, об'єм та структуру дисертації.

Перший розділ присвячений літературним першоджерелам, у яких відображено основні електрофізичні властивості твердих розчинів кремній-германій. Детально розглянуто експериментальні та теоретичні відомості про зонну структуру даних розчинів.

Перебудова енергетичних зон у кристалах твердих розчинів кремній-германій здійснюється за рахунок зміни концентрації легуючої ізовалентної домішки. Розглянуто публікації про тензо- та атомнопереорієнтаційні ефекти зумовлені радіаційними дефектами (А-центрами). Особлива увага приділена механізмам розсіювання електронів провідності, які лімітують рухливість носіїв у твердих розчинах кремній-германій.

Основні риси анізотропного розсіювання носіїв заряду на акустичних фонах, іонізованих

домішках і міждолинного розсіяння у напівпровідникових кристалах п-кремнію та п-германію обумовлені анізотропією ефективних мас і анізотропією часу релаксації. У твердих розчинах кремній-германій крім вище згадуваних механізмів розсіяння виникають додаткові – на ізовалентних домішках та флуктуаціях складу. При збільшенні концентрації неосновної компоненти твердого розчину на процеси перенесення заряду все більше впливатиме неупорядкованість ґратки. Відмічено, що для кристалів твердих розчинів Ge<Si> у дифузійному наближенні вдається досить добре описати поведінку рухливості в достатньо широкому температурному інтервалі.

Огляд літературних даних обґрунтовує актуальність поставленої задачі.

Другий розділ містить опис і аналіз технічних характеристик установ-ки, на якій проведена експериментальна частина роботи. Дано обґрунтування методу досліджень тензоефектів за допомогою одновісної пружної деформації. Приведено конструкцію інформаційно-виміральної системи, яка створена на основі сучасних комп'ютерних технологій і забезпечує:

- реєстрацію та створення бази даних досліджуваних величин;
- обробку (в залежності від експерименту) сформованої бази даних;
- спостереження на моніторі комп'ютера вихідних величин (таблиці, графіки).
- збереження інформації з можливістю подальшої роботи з ними в більшості прикладних програм.

Описано методику підготовки зразків для досліджень.

Третій розділ присвячено результатам дослідження тензоефектів у кристалах твердих розчинів Si<Ge>. Досліджувались невідроджені напівпровідникові кристали Si<Ge> n-типу, вирощені методом Чохральського концентрацією неосновної компоненти N_{Ge}, яка змінювалась в інтервалі $2 \cdot 10^{19} \div 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, та з вмістом кисню $(6 \div 8) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ й вуглецю $\sim 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Для порівняння результатів вимірювання проводились при тих же умовах на контрольних зразках п-кремнію без ізовалентної домішки германію.

Для аналізу тензоефектів у кристалах твердих розчинів кремній-германій спочатку було досліджено вплив ізовалентної домішки на рухливість μ носіїв струму. Теоретичні розрахунки рухливості у п-кремнії без ІВД германію із врахуванням розсіяння на довгохвильових акустичних фонах і міждолинного розсіяння імпульсу при взаємодії електронів із фонами відповідних усереднених температур 190К і 630К дають доволі добре узгодження з експериментом у широкому температурному інтервалі 80...450К. Характерною особливістю залежностей $\mu = f(T)$ для п-кремнію з ІВД германію є занижені значення рухливості електронів при температурах $T < 200\text{К}$ у порівнянні з п-Si вільним від ІВД. Таке зменшення рухливості могло спостерігатися при збільшенні концентрації іонізованих домішок, однак, у досліджуваних кристалах вона була практично однакова. Отже, при зниженні температури кристалів $< 200\text{К}$ і концентраціях неосновної компоненти $N_{\text{Ge}} \cong 2 \cdot 10^{19} \div 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ крім типових механізмів розсіяння додається механізм розсіяння електронів на ІВД германію. В області температур 220...450К нахили всіх кривих практично однакові ($\mu \propto T^{-2.3}$), що свідчить про основну роль міждолинного розсіяння і розсіяння на коливаннях ґратки в досліджуваних кристалах.

Відомо, що у кремнії можливими є міждолинні переходи електронів із поглинанням чи випусканням фононів двох типів: g- та f-переходи. Застосування сильних одновісних деформацій (P||[100]) дозволяє реалізувати двохдолинну зону провідності. Значення рухливості електронів провідності, які одержані при таких експериментальних умовах ([100]||P=14000кГ/см²), для кристалів п-кремнію з різними концентраціями ІВД германію в температурному інтервалі 77...350К досить точно лягають на одну пряму в координатах $\lg \mu = f(\lg T)$ з нахилом $m = -1.6$, що свідчить про визначальний вклад f – переходів у

міждолинне розсіювання електронів як у звичайному кремнії, так і твердих розчинах Si<Ge> при $N_{Ge} \leq 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Результати досліджень поздовжнього п'єзоопору від тиску P||J[100] для кристалів n-Si без ІВД і n-кремнію з різним вмістом ізовалентної домішки германію показали, що загальною особливістю залежностей $\rho_p / \rho_0 = f(P)$ є зменшення величини п'єзоопору, що чітко виявляється в області насичення, із збільшенням концентрації ІВД Ge. Оскільки явище тензоефекту зумовлене анізотропією направлено деформованого кристала, то з отриманих результатів випливає, що введення в кристал ІВД змінює відповідні анізотропні параметри. На основі залежностей $\rho_p / \rho_0 = f(P)$ визначено параметр анізотропії рухливості

$$K = \frac{3}{2} \frac{\rho_\infty}{\rho_0} - \frac{1}{2},$$

який із збільшенням концентрації ІВД германію зменшується. Параметр анізотропії рухливості пов'язаний з іншими важливими характеристиками анізотропних властивостей кристала – це параметр анізотропії ефективних мас та параметр анізотропії часів релаксації: $K = K_m / K_t$. Значення K й K_t отримані для кристалів n-Si з ІВД германію та звичайного n-Si практично співпадають з літературними даними для кристалів з такою ж концентрацією іонізованих донорів ($N_i < 10^{14} \text{ см}^{-3}$). Наближення параметра анізотропії часів релаксації K_t до одиниці (рис. 1) при зростанні концентрації ІВД германію до 10^{20} см^{-3} свідчить про те, що при вказаній концентрації розсіювання на ІВД германію в кристалах кремнію близьке до ізотропного.

Рис. 1. Залежність K_t від концентрації домішок у n-Si:

1 – теоретична крива при врахуванні анізотропного розсіювання на іонізованих донорах,

г · – дослідні дані;

? – експериментальні результати для кристалів Si<Ge>.

За експериментальними результатами п'єзоопору та рухливості було визначено значення $\mu_{||}$ і $\mu_{\perp}$ в окремо взятому ізоенергетичному еліпсоїді. Встановлено, що $\mu_{||}$ практично не залежить (з точністю до 4%) від концентрації ізовалентної домішки, тоді як $\mu_{\perp}$ суттєво зменшується при збільшенні вмісту ІВД германію у n-Si (рис. 2). Така поведінка $\mu_{||}$, $\mu_{\perp}$ знаходиться в повній відповідності з дослідними даними по п'єзоопору і свідчить про суттєвий вплив наявності ІВД на величину $\tau_{\perp}$.

Рис. 2. Залежності $\mu_{||} = f(N_{Ge})$ і $\mu_{\perp} = f(N_{Ge})$ для кристалів n-Si з різним вмістом ІВД германію.

За результатами досліджень поздовжнього п'єзоопору визначено константи деформаційного потенціалу. Виявляється, що для чистого n-Si, вільного від ІВД і для кристалів n-Si з ІВД германію аж до концентрацій $N_{Ge} < 7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ значення константи деформаційного потенціалу не змінюється і становить 9.3eВ. Лише при збільшенні концентрації до $N_{Ge} = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ спостерігається тенденція зменшення величини константи деформаційного потенціалу до 9.0eВ. Радіаційні ефекти досліджувались у кристалах твердих розчинів кремній-германій, вирощених методом Чохральського, n-типу з питомим опором 40...42 Ом*см, концентрацією ізовалентної домішки $N_{Ge} = 7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Опромінення гама-квантами ^{60}Co проводилося дозами до $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ при кімнатних температурах. За вимірюваннями електропровідності та ефекту Холла побудовано температурні залежності носіїв струму в

кристалах n-Si<Ge> після гама-опромінення. За нахилами залежностей $n=f(10^3/T)$ визначено положення енергетичного рівня радіаційних дефектів у забороненій зоні. Глибина залягання рівня становить $E_C=0.19\text{eV}$ і належить А-центру. Отримані експериментальні дані дали можливість визначити концентрації А-центрів в опроміненних кристалах. Вони виявилися рівними $2.7 \cdot 10^{14}\text{см}^{-3}$ та $2.9 \cdot 10^{14}\text{см}^{-3}$. Встановлено, що середня швидкість генерації А-центрів при гама-опроміненні дорівнює $\sim 7 \cdot 10^{-4}\text{см}/\gamma\text{-кв}$ і не залежить від наявності ІВД германію аж до концентрацій $N_{Ge} \leq 7 \cdot 10^{19}\text{см}^{-3}$. Дослідження впливу сильних ОПД на положення рівня А-центра в забороненій зоні твердих розчинів кремній-германій показало, що у кристалах Si<Ge> енергетична щілина між рівнем А-центра і нижніми долинами зони провідності лінійно зменшується із збільшенням тиску вздовж осей [100], [110], [111]. На відміну від n-кремнію без ІВД германію, в твердих розчинах Si<Ge> спостерігається помітна зміна концентрації носіїв струму і при тиску вздовж напрямку [111]. Баричні коефіцієнти зміни енергетичної щілини для А-центра в n-Si<Ge> виявилися рівними: $5.3 \cdot 10^{-3}\text{eV/кбар}$, $1.3 \cdot 10^{-3}\text{eV/кбар}$, $0.6 \cdot 10^{-3}\text{eV/кбар}$ для напрямів [100], [110], [111] відповідно. Зміщення самого енергетичного рівня $E_C=0.19\text{eV}$ в n-Si<Ge> дає значення $0.7 \cdot 10^{-3}\text{eV/кбар}$ і $0.2 \cdot 10^{-3}\text{eV/кбар}$ вгору за шкалою енергій для напрямку [100] і [110] відповідно. Для випадку P[[111] величину зміщення визначити не вдається, але зрозуміло, що за напрямом це зміщення співпадає з рухом долин зони провідності.

В гама-опроміненних кристалах n-Si<Ge> вперше виявлена релаксація п'єзоопору, зумовлена атомною переорієнтацією А-центрів. Особливістю цього дефекту є те, що у випадку тиску P[[111] опір кристалів n-Si<Ge> зростає з часом, тоді як для аналогічних кристалів n-кремнію без ІВД германію він зменшується. Така відмінність полягає в тому, що при наявності домішки германію з концентрацією $\sim 10^{20}\text{см}^{-3}$ в ґратці кремнію існують значні внутрішні напруження і найбільші в напрямках, близьких до [111]. Даний факт підтверджується тим, що експериментально визначена енергія атомної переорієнтації помітно відрізняється для випадків P[[111], P[100] і складає 0.37eV, 0.32eV відповідно.

Четвертий розділ присвячено дослідженню процесів розсіяння електронів провідності у кристалах твердих розчинів кремній-германій. При легуванні напівпровідників ізовалентними домішками внаслідок різної просторової протяжності хвильових функцій електронів атомів ІВД і найближчих сусідів основної компоненти виникають короткодійочі сили та ефективний заряд e_{ef} . Короткодійочі сили центральної комірки ІВД моделювались іонним домішковим потенціалом та локальною деформацією ґратки, оскільки:

- по-перше, легування ізовалентною домішкою спричиняє зміну розподілу густини заряду в околі домішки, потенціал домішки відрізняється від потенціалу заміщеного атома, а їх різниця дає так зване локальне збурення потенціалу;
- по-друге, внаслідок різниці ковалентних радіусів основної компоненти кремнію та ІВД германію в околі заміщення виникають внутрішні напруження: деформується кристалічна ґратка, змінюється її стала.

Отже, для електрона провідності у кристалі з ізовалентною домішкою розсіювачем буде не сама домішка, а комплекс – атом домішки та її оточення.

У випадку сферичної ізоенергетичної поверхні з квадратичною залежністю енергії електрона E від хвильового вектора k , час релаксації електронів, які розсіюються ізовалентними домішками, визначається згідно співвідношення:

$$\tau^{-1} = \frac{2\pi m^*}{k \hbar^3} \sum_{\vec{k}'} \overline{H_{\vec{k}\vec{k}'}}^2 \delta(\vec{k} - \vec{k}') (1 - \cos(\theta)),$$

де $H_{\vec{k}\vec{k}'}$ – матричний елемент розсіяння електронів на ізовалентних домішках, θ – кут між $\vec{k}$ і $\vec{k}'$.

На основі даних міркувань проведено теоретичний розрахунок рухливості електронів провідності при розсіюванні на ізовалентних домішках:

$$\mu = \frac{e}{m^*} \langle \tau \rangle, \quad \langle \tau \rangle = \frac{3}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^{3/2} e^{-x} \tau.$$

Для аналізу теоретичних розрахунків рухливості при розсіянні лише на атомах ІВД було визначено на основі експериментальних досліджень ефекту Холла вклад у процеси розсіяння ізовалентних домішок. Так як для вивчення впливу ізовалентних домішок на рухливість носіїв підбирались кристали, в яких концентрації інших домішок (вуглець, кисень, фосфор) практично однакові, то механізми розсіяння електронів на цих домішках будуть подібні та їх вклад у загальну рухливість практично однаковим для всіх кристалів. Отже, розсіювання на ізовалентних домішках можна виділити, використовуючи відоме співвідношення Матіссена.

Встановлено, що експериментальні залежності рухливості, зумовленої лише розсіюванням на атомах ІВД, проявляють температурну залежність $\sim T^{-0.49}$. Теоретичний розрахунок рухливості при розсіюванні тільки на ізовалентних домішках показує, що вона проявляє температурну залежність $\sim T^{-0.49}$, що добре узгоджується з експериментальними результатами.

Аналіз концентраційних залежностей рухливості електронів дає змогу встановити мінімальне значення концентрації ізвалентної домішки, яка спричиняє відчутний вплив на процеси розсіяння. В результаті виявлено, що при концентраціях ІВД германію $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ та температурі 77К при існуючих механізмах розсіяння суттєвим стає розсіювання на ІВД.

Крім того, встановлено, що рухливість виявляє концентраційну залежність $\sim N_{\text{Ge}}^{-0.61}$. Згідно з теоріями, які розглядають розсіювання на нейтральних домішках, слід було б очікувати залежність $\sim N_{\text{Ge}}^{-0.61}$. Проте, як засвідчує аналіз літературних джерел, результати досліджень фононних спектрів показують, що атоми Ge прагнуть займати декілька сусідніх вузлів ґратки, а тому є підстави вважати, що така відмінність у залежностях зумовлена тим, що атоми германію входять у кристал кремнію невеликими кластерами.

Проведено аналіз рухливості носіїв струму у твердих розчинах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ з точки зору існування неоднорідностей розподілу неосновної компоненти. Для визначення впливу флуктуацій складу на кінетичні ефекти у твердих розчинах було використано дифузійне наближення, в якому холлівська рухливість визначається згідно співвідношення:

$$\mu_n = \mu_n^0 \frac{3(2-\varepsilon)}{5-2\varepsilon},$$

Розрахунки показують, що для кристалів $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ атоми неосновної компоненти германію утворюють угруповання від 20 до 100 атомів залежно від рівня легування. Встановлено, що для даного інтервалу концентрацій ефективні значення геометричного розміру неоднорідностей знаходяться в межах 20...200Å. Використане наближення, за допомогою якого вдалося задовільно описати поведінку рухливості в достатньо широкому температурному інтервалі 77...200К (рис.3), засвідчує про спільність причин зниження рухливості у твердих розчинах із

Рис.3. Теоретичні (суцільні) та експериментальні температурні залежності $\Delta\mu$ твердих розчинів $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ при різних концентраціях Ge:

$$1 - N_{\text{Ge}} = 4 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3},$$

$$2 - N_{Ge} = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}.$$

збільшенням концентрації неосновної компоненти як у кристалах кремній-германій, так і у кристалах германій-кремній.

ВИСНОВКИ

Результати досліджень електрофізичних властивостей твердих розчинів кремній-германій *n* - типу дають змогу зробити наступні суттєві висновки:

1. В області сильних одновісних пружних деформацій вздовж кристалографічного напрямку [100] п'єзоопір невідроджених кристалів *n*-Si, легованих ізовалентною домішкою германію, визначається перерозподілом електронів між еквівалентними (при відсутності деформації) долинами зони провідності, причому збільшення концентрації ІВД Ge приводить до зменшення ефекту п'єзоопору, що найбільш рельєфно проявляється в області насичення, параметра анізотропії рухливості. Параметр анізотропії часів релаксації при розсіянні електронів провідності на ізовалентних домішках прямує (при $N_{Ge} \sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$) до одиниці, що свідчить про ізотропність процесу розсіяння на ІВД при відміченій концентрації. Чутливим параметром щодо введення додаткового механізму розсіяння є поперечна складова рухливості електронів. Константа деформаційного потенціалу для концентрацій ІВД $N_{Ge} < 7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ не змінюється. З підвищенням концентрації ІВД германію до $N_{Ge} = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ спостерігається тенденція до зменшення константи деформаційного потенціалу до 9.0eV.
2. Ізовалентна домішка германію (при концентраціях $N_{Ge} < 7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$) практично не впливає на інтенсивність утворення А-центрів гама-опромінених кристалів при кімнатних температурах, проте, призводить до збільшення глибини залягання А-центрів у забороненій зоні до 0,19eV. Крім того, наявність ІВД германію зумовлює зміщення енергетичного рівня А-центра під дією одновісної пружної деформації і для напрямку [111], що не спостерігається у кристалах *n*-кремнію без ІВД Ge. У гама-опромінених кристалах *n*-Si<Ge> виявлена релаксація п'єзоопору, зумовлена атомною переорієнтацією А-центрів.
3. При зниженні температури кристалів менше 200K і концентраціях неосновної компоненти від $2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ до $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ крім існуючих механізмів розсіяння додається механізм розсіяння електронів на ІВД германію. В області температур 220...450K нахили всіх кривих однакові, що свідчить про основну роль міждолинного розсіяння і розсіяння на коливаннях ґратки в досліджуваних кристалах. Порівняння температурних залежностей рухливості електронів у температурному інтервалі 77...300K для недеформованих та пружнодеформованих (при повному міждолинному перерозподілі електронів) кристалів Si<Ge> свідчить про визначальний вклад *f*-переходів у міждолинне розсіяння у твердих розчинах Si<Ge> при $N_{Ge} \leq 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ так само як і в *n*-кремнії без ІВД Ge. Експериментально встановлено та теоретично обґрунтовано, що рухливість, яка характеризує розсіяння на ІВД, проявляє температурну залежність $\sim T^{-0.5}$.
4. Запропоновано метод визначення концентрації ізовалентної домішки, яка суттєво починає впливати на загальну рухливість носіїв струму при певних значеннях температури та концентрації іонізованої домішки.
5. У твердих розчинах Si<Ge> атоми ізовалентної домішки германію утворюють невеликі кластери, кількість атомів у яких змінюється в межах від 20 до 100, залежно від рівня легування; ефективні значення геометричного розміру таких неоднорідностей знаходяться в межах 20...200Å. Використання дифузійного наближення дає змогу описати температурну

залежність рухливості в кристалах Si<Ge> в інтервалі температур 77...200K, причому, причини зменшення рухливості електронів як у кристалах Ge<Si> так і в кристалах Si<Ge> обумовлені неоднорідністю розподілу неосновної компоненти твердого розчину у вигляді флуктуаційних скупчень атомів цієї компоненти (кластерів) і локальними механічними напруженнями кристалічної ґратки, пов'язаними з наявністю цих кластерів.

Публікації. Основні результати дисертації опубліковані в наступних роботах:

1. A.Semenyuk, A.Korovytsky Study of electrophysical parameters and tensoeffects in n-type Si<Ge> crystals // Functional materials. – 2001. – v.8, №3. – P. 493-497.
2. Семенюк А., Коровицький А. Вплив ізовалентної домішки германію на розсіювання електронів у кремнії // Фізичний вісник НТШ. – т. 4. – 2001. – С. 124-128.
3. Семенюк А., Коровицький А. Про розсіювання електронів у кремнії з домішкою германію // Науковий вісник ВДУ. Серія фізичні, хімічні, математичні науки. – Луцьк: Волин. держ. ун-т ім. Лесі Українки. –1998. – №6. – С. 8 – 11.
4. А. Семенюк, А. Коровицький Тензоефекти в п-кремнії з ізовалентною домішкою германію // Науковий вісник ВДУ. Фізичні науки. – Луцьк: Волин. держ. ун-т ім. Лесі Українки. – 1999. – № 14. – С. 119-124.
5. Коровицький А.М. Вплив неоднорідних областей на рухливість носіїв струму в твердих розчинах $Si_{1-x}Ge_x$ // Науковий вісник ВДУ. Фізичні науки. – Луцьк: Волин. держ. ун-т ім. Лесі Укранки. – 2001. – №7. – С. 58-60.
6. A. Semeniuk, A. Korovytsky The influence of isovalent impurity of germanium upon the electrophysical properties of silicon // Науковий вісник ВДУ. Серія фізичні науки. – Луцьк: Волин. держ. ун-т ім. Лесі Українки. – 2001. – №7. – С. 53-58.
7. Дослідження радіаційних дефектів в кристалах кремнію і твердих розчинах кремній германій: Звіт про НДР (заключний) / Луцький держ. техн. ун-т; № ДР 0198У000265. – Луцьк, 1999. – 67с.
8. Семенюк А., Коровицький А. Моделювання потенціалу ізовалентної домішки в ковалентних кристалах і його роль у розсіюванні електронів // Тези доповідей 4th International modeling school of AMSE_UAPL, Crimea 2000. – Rzeszyw: Politechnika Rzesz. – 2000. – С. 231-232.
9. Коровицький А.М., Семенюк А.К. Дослідження впливу ізовалентної домішки Ge на рухливість електронів у n-Si // Фундаментальні і прикладні проблеми сучасної фізики. Матеріали II Міжнародного Смакулового симпозиуму. – Тернопіль: ТДТУ, Джура. – 2000. – С. 163-164.
10. Семенюк А.К., Коровицький А.М. Розсіювання електронів у кристалах твердих розчинів кремній-германій // Тези доповідей Міжнародної наукової конференції присвяченої 150-річчю від дня народження видатного українського фізика і електротехніка Івана Пулюя. – Львів: Держ. ун-т “Львівська політехніка”. – 1995. – С. 76.
11. Коровицький А.М. Дослідження впливу ізовалентних домішок Ge на тензоефекти та міцність кристалів Si // Тези Першого наукового симпозиуму “Сучасні проблеми інженерної механіки”. – Луцьк: ТзОВ “Ковельська міська друкарня”. – 2000. – С. 57-58.
12. Коровицький А.М. Дослідження особливостей розсіювання електронів на ізовалентних домішках у кристалах твердих розчинів Si<Ge> // Збірник наукових праць ЛПІ (ч.І). – Луцьк: Волин. держ. ун-т ім. Лесі Українки. – 1997. – С. 153-156.
13. Семенюк А.К., Коровицький А.М. Електронні властивості багатодолинних напівпровідників із радіаційними дефектами // Збірник наукових статей ЛДТУ ч.І. – Луцьк: Луцький держ. техн. ун-т. –1998. – С. 163-167.
14. Семенюк А.К., Коровицький А.М. Вплив ізовалентної домішки германію в кристалах кремнію на рухливість електронів // Збірник наукових статей ЛДТУ ч.І. – Луцьк: Луцький держ. техн. ун-т. –1998. – С. 159-163.
15. Коровицький А.М. Розсіювання електронів на ізовалентних домішках у кристалах твердих розчинів Si<Ge>. Науковий вісник ЛДТУ. – Луцьк: Луцький держ. техн. ун-т. – 1999. – № 1.

– С. 37-44.

16. Семенюк А.К., Коровицький А.М. Міждолинне розсіювання електронів у кремнії з домішкою германію // Тези доповідей IX науково-технічної конференції професорсько-викладацького складу ЛПІ. – Луцьк: ТЗОВ “Ковельська міська друкарня”. – 1994. – С. 103.
17. Семенюк А.К., Коровицький А.М. Особливості кінетичних ефектів у кристалах твердих розчинів кремній-германій // Тези доповідей X науково-технічної конференції професорсько-викладацького складу ЛПІ. – Луцьк: ТЗОВ “Ковельська міська друкарня”. – 1995. – С.186.

АНОТАЦІЇ

Коровицький А.М. Кінетичні ефекти у твердих розчинах кремній-германій. – Рукопис. Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01. 04. 10 – фізика напівпровідників і діелектриків. – Волинський державний університет ім. Лесі Українки, Луцьк, 2002.

Дисертація присвячена дослідженню кінетичних ефектів у твердих розчинах кремній-германій $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. Встановлено, що збільшення концентрації неосновної компоненти спричиняє зменшення ефекту п'єзоопору, параметра анізотропії рухливості. Чутливим параметром щодо введення додаткового механізму розсіювання є поперечна складова рухливості електронів. При $N_{\text{Ge}} \geq 7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ спостерігається тенденція до зменшення константи деформаційного потенціалу. У гама-опромінених кристалах n-Si<Ge> виявлена релаксація п'єзоопору, зумовлена атомною переорієнтацією А-центрів. Експериментально встановлено та теоретично обґрунтовано, що рухливість, яка характеризує розсіювання на ізовалентних домішках, проявляє температурну залежність $\sim T^{-0.5}$. Показано, що у твердих розчинах Si<Ge> атоми неосновної компоненти германію утворюють невеликі кластери, кількість атомів у яких змінюється в межах від 20 до 100, залежно від рівня легування; ефективні значення геометричного розміру таких неоднорідностей знаходяться в межах 20...200Å.

Ключові слова: кінетичні ефекти, твердий розчин, напівпровідник, рухливість, ізовалентна домішка, радіаційні дефекти, кластер.

A.M.Korovytsky. Kinetic effect in silicon-germanium solid solutions. – Manuscript. Thesis for Candidate's of Science Degree on speciality 01.04.10 – semiconductors and dielectric physics. Lesia Ukrainka Volyn State University, Lutsk, 2002.

The thesis is dedicated to investigation of kinetic effects in silicon-germanium solid solutions ($\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$). It has been determined that the increase of piezoresistance effect and mobility anisotropy parameter. Lateral component of electron mobility is a sensitive parameter in respect to the introduction of additional scattering mechanism. At $N_{\text{Ge}} \geq 7 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ a tendency of decreasing the deformation potential constant is observed. Piezoresistance relaxation caused by the atomic reorientation of A-centres has been fixed in γ -irradiated crystals n-Si<Ge> . It has been experimentally determined and theoretically grounded that the mobility which characterizes scattering on isovalent impurities manifests temperature dependency $\sim T^{-0.5}$. It is shown that atoms of germanium nonbasic components form small clusters with the number of atoms changing on the level doping. The effective values of geometric dimensions are within 20...200Å.

Key words: kinetic effects, solid solution, semiconductors, isovalent impurity, radiation-induced defects, clusters.

Коровицкий А.М. Кинетические эффекты в твердых растворах кремний-германий. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01. 04. 10 – физика полупроводников и диэлектриков. – Волынский государственный университет им. Леси Украинки, Луцк, 2002.

Диссертация посвящена изучению кинетических эффектов в твердых растворах кремний-германий. Показано, что в области сильных упругих одноосных деформаций вдоль кристаллографического направления $[100]$ пьезосопротивление невырожденных кристаллов $n\text{-Si}\langle\text{Ge}\rangle$ определяется перераспределением электронов между эквивалентными долинами (при отсутствии деформации) зоны проводимости, причем при увеличении концентрации изовалентной примеси (ИВП) Ge пьезосопротивление и параметр анизотропии подвижности уменьшаются. Параметр анизотропии времен релаксации при рассеянии на ИВП стремится (при $N_{\text{Ge}} \sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$) к единице, что указывает на изотропность процессов рассеивания электронов проводимости на ИВП, при указанной выше концентрации Ge. Чувствительным параметром относительно дополнительного механизма рассеяния является перпендикулярная составляющая подвижности электронов. Установлено, что константа деформационного потенциала для концентраций ИВП $N_{\text{Ge}} < 7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ не изменяется, а при увеличении концентрации ИВП германия до $N_{\text{Ge}} = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ обнаруживается тенденция к уменьшению этой константы до значений 9.0eV.

Установлено, что изовалентная примесь германия практически не влияет на интенсивность образования А-центров при γ -облучении, но приводит к увеличению энергетического зазора между дном с-зоны и уровнем А-центра до 0.19eV. Кроме того, ИВП Ge обуславливает смещение энергетического уровня А-центра под воздействием одноосной упругой деформации и для направления $[111]$, чего не наблюдается в кристаллах $n\text{-Si}$ без ИВП Ge. В γ -облученных кристаллах $n\text{-Si}\langle\text{Ge}\rangle$ обнаружена релаксация пьезосопротивления, обусловленная атомной переориентацией А-центров.

Показано, что при $T < 200\text{K}$ и концентрациях неосновной компоненты N_{Ge} ($2 \cdot 10^{19} \dots 2 \cdot 10^{20}$) см^{-3} твердого раствора $\text{Si}\langle\text{Ge}\rangle$ кроме существующих механизмов рассеяния проявляется дополнительный механизм рассеяния электронов на ИВП германия. В области температур 220...450K основной вклад вносит междолинное рассеяние и рассеяние на колебаниях решетки. Сравнение температурных зависимостей подвижности электронов в температурном диапазоне 77...300K для недеформированных и упругодеформированных (при полном междолинном перераспределении) кристаллов $\text{Si}\langle\text{Ge}\rangle$ свидетельствует об основном вкладе f – переходов в междолинное рассеяние в твердых растворах $\text{Si}\langle\text{Ge}\rangle$ при $N_{\text{Ge}} \leq 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ так же как и в n -кремнии без ИВП Ge. Экспериментально установлено и теоретически обосновано, что подвижность, которая характеризует рассеяние на ИВП, имеет температурную зависимость $\sim T^{-0.5}$.

Исследовано, что в твердых растворах $\text{Si}\langle\text{Ge}\rangle$ атомы неосновной компоненты германия локализуются в виде небольших кластеров, количество атомов в которых изменяется в пределах от 20 до 100 в зависимости от уровня легирования, причем эффективные значения геометрических размеров таких скоплений (кластеров) составляет 20...200Å. Использование диффузионного приближения дает возможность описать температурную зависимость подвижности в кристаллах $\text{Si}\langle\text{Ge}\rangle$ в диапазоне температур 77...200K, что указывает на общность причин лимитирующих подвижность как в кристаллах $\text{Ge}\langle\text{Si}\rangle$ так и в кристаллах $\text{Si}\langle\text{Ge}\rangle$, которые обусловлены неоднородным характером распределения неосновной компоненты твердого раствора.

Ключевые слова: кинетические эффекты, твердый раствор, полупроводник, подвижность, изовалентная примесь, радиационные дефекты, кластер.