

Уколов О.І., Любченко І.В, Уколова Ю.В.

Слов'янський державний педагогічний університет

Горлівський автомобільно-дорожній інститут

Горлівський регіональний інститут університету «Україна»

Особливості поверхневої дифузії у напівпровідниках

Поверхнева дифузія – це розповсюдження речовини по поверхні твердого тіла, відноситься до явищ, що визначають багато важливих властивостей кристалів. Її прикладне значення пов'язане з участю в процесах спікання і адгезії твердих тіл, адсорбційного пониження їх міцності, старіння (деградації) напівпровідникових тонких плівок і шаруватих систем. У напівпровідниковій електроніці поверхнева дифузія відіграє суттєву роль в технології виготовлення епітаксальних структур, при легуванні тонких (1 мкм) шарів, а також створенні електродів і контактів. Встановлено, що мікромеханізми дифузії залежать від структури, динаміки і електронних параметрів поверхні. Тому вивчення міграції атомів на поверхні викликане прагненням розширити наукові уявлення про різноманітні фізико - хімічні властивості міжфазних меж. Результати досліджень поверхневої дифузії говорять про те, що за формальними характеристиками і фізичними механізмами мас-перенесення на межі кристал – вакуум, принципово відрізняється від спостережуваного в об'ємі. В даній проблемі багато невияснених моментів. Із загальних питань залишаються відкритими такі: можливість мас-перенесення, що протікає по кластерному механізму з низькими значеннями енергії активації; співвідношення внесків в дифузію, обумовлених атомним потенціальним рельєфом поверхні і її природною шорсткістю; способи впливу адсорбованих атомів на само- і гетеродифузію уздовж межі кристала; дифузійна проникність приповерхневої області та ін.

В даній роботі зроблена теоретична оцінка енергії міграції вакансій у

приповерхневих шарах кристала напівпровідника з урахуванням наявності механічних напружень та ультразвукового (УЗ) опромінення.

Дифузії по поверхні завжди надавалося велика увага [1-4], проте в основному дані цих робіт відносяться до «реальних» кристалів. Для опису сучасних уявлень про це явище скористаємося відомостями, одержаними в [5] які відіграють важливу роль у встановленні загальних закономірностей дифузії на межі фаз, оскільки у багатьох випадках поверхневе мас - перенесення має схожі риси у кристалах різних типів. Існує декілька способів вивчення поверхневої дифузії, які можна розбити на дві групи залежно від того, супроводжується дифузія мас-перенесенням чи ні [5]. При такому розподілі фактично всі методи відносяться до першої групи, що припускає вимірювання величини дифузійних потоків по яких-небудь фізичних характеристиках. Друга група включає єдиний метод - радіоактивних ізотопів, що дає можливість досліджувати самодифузію без мас - перенесення (перемішування різних ізотопів в кристалічних ґратках). При цьому у вибраній даній області кристалічної ґратки концентрація частинок не змінюється.

Розглянемо параметри, що характеризують моноатомну поверхневу дифузію. Дифузійний потік визначається коефіцієнтом D_s , в якому, згідно теорії [3], передекспонента D_s^0 може бути записана у вигляді

$$D_s^0 = l^2 \nu \exp\left(\frac{\Delta S}{k_B}\right) \quad (1)$$

де l - довжина елементарного стрибка; ν - частота коливань атома у вузлі ґратки (близько 10^{13} c^{-1}); ΔS - зміна ентропії системи в процесі дифузії. Для об'єму кристалів встановлені сильні зміни значення передекспоненти від речовини до речовини (10^{-4} - $10^6 \text{ см}^2/\text{c}$), які не можна пояснити відмінностями значень l і ν . Тому теорія розглядає ентропію системи як основний чинник, що визначає величину. Аналіз [3,4] показав, що величина ΔS є функцією пружних властивостей кристала і енергії активації ($\Delta S \sim E_a$).

На поверхні не виконується умова малості концентрації вакансій, яка властива об'єму, тому різко змінюються атомна структура, динаміка, електронний спектр. Тому основним параметром, який характеризує кінетику процесу поверхневої дифузії, є енергія міграції вже існуючих у приповерхневому шарі кристала вакансій. Використовуючи структурні результати отримані в [6], знайдемо енергію міграції вакансій E_m у приповерхневому шарі Ge за формулою

$$E_m = -kT \ln \frac{x^2}{2D_s^0 \tau} \quad (2)$$

де x – відстань пробігу вакансій 96,8 мкм, D_s^0 – передекспонента $10^{-4} \text{см}^2/\text{с}$ [7], τ – тривалість випробування зразка 0,5 год., $kT=0,0258 \text{eV}$. З розрахунку згідно (2) одержимо $E_m=0,213 \text{eV}$. Можна оцінити окремо внесок у зменшення E_m дії ультразвуку і деформації стискання. Під дією УЗ коливань відбувається стимульована дифузія вакансій за рахунок зменшення потенціального бар'єру на величину E_{us} , яка дорівнює

$$E_{us} = V_{us} \sigma_{us}, \quad (3)$$

де V_{us} – ефективний об'єм акустодфектної взаємодії, який дорівнює $1,728 \cdot 10^{-27} \text{м}^3$; $\sigma_{us}=(2\rho vI)^{1/2}=17 \cdot 10^6 \text{н/м}^2$ – механічне напруження в УЗ полі, $\rho=5,323 \cdot 10^3 \text{кг/м}^3$ – густина Ge, $v=5,41 \cdot 10^3 \text{м/с}$ – швидкість поширення УЗ хвилі, $I=5 \cdot 10^6 \text{Вт/м}^2$ – інтенсивність УЗ опромінення. Знайдена величина $E_{us}=0,1836 \text{eV}$.

Ще більше прискорюється дифузія при наявності градієнта хімічного потенціалу вакансій у полі прикладених механічних напружень. При цьому потенціальний бар'єр зменшується на величину E_D

$$E_D = \sigma_D v_a \quad (4)$$

У формулі (4) $\sigma_D=117,6 \cdot 10^6 \text{н/м}^2$, $v_a = 0,181 \cdot 10^{-27} \text{м}^3$ – атомний об'єм, $E_D=0,133 \text{eV}$. Енергію вакансій у приповерхневому шарі кристала Ge при 310 К без урахування деформування і УЗ опромінення можна знайти як $E_{m0} = E_m + E_{us} + E_D = 0,53 \text{eV}$, що

співпадає з [8]. Коефіцієнт дифузії вакансій у приповерхневому шарі кристала для визначених умов експерименту $D_S = D_S^0 \exp(-E_m/kT) = 2,62 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{с}$.

Треба зазначити що, в даний час, ще немає загальної теорії здатної описати зародження і характер міграцій на поверхні. Аналіз робіт показав, що явища поверхневої дифузії досліджуються в основному за допомогою термодинамічного підходу. Проте, слід зазначити, що вивчення дифузії на поверхні напівпровідників, потребують квантово-механічного розгляду з урахуванням динаміки ґратки біля поверхні.

Література:

1. Блейкли Д.М. Поверхностная диффузия.— М., Metallurgiya, 1965, 127 с.
2. Шьюмон П. Диффузия в твердых телах.— М., Metallurgiya, 1966, 195 с.
3. Болтакс Б.И. Диффузия в полупроводниках.— М., Физматгиз, 1961, 462 с.
4. Поверхностная диффузия и растекание. Под ред. Я. Е. Гегузина.— М., Наука, 1969, 283 с.
5. Нестеренко Б. А., Снитко О. В. Физические свойства атомно-чистой поверхности полупроводников.— М., Наука, 1988, 335 с.
6. Надточий В.А., Уколов А.И., Нечволод Н.К. Материалы международной конференции «XIX Петербургские чтения по проблемам прочности», Санкт-Петербург, 2010.
7. В.П. Алехин. Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов. — М., Наука, 1983, 280 с.
8. В.В.Емцев, Т.В. Машовец. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках. Под ред. профессора С.М. Рывкина. — М., Радио и связь, 1981, 248 с.