

УДК 621.315.592

PACS-number(s): 61.80Az, 61.80Cb, 61.72Ss, 68.55Ln

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ РАДІАЦІЙНО СТИМУЛЬОВАНИХ ЗМІН ПАРАМЕТРІВ КРИСТАЛІВ CdS В ОБЛАСТІ МАЛИХ ДОЗ ПОГЛИНУТИХ ЕНЕРГІЙ

Б. Павлик, М. Лишак, О. Клочан

*Львівський національний університет імені Івана Франка
вул.Тарнавського, 107, Львів, 79017*

З'ясовано, що для пояснення ефекту радіаційно стимульованого впорядкування необхідно враховувати часову залежність часу життя дефектів. Запропоновано фізичну модель, яка пояснює спостережувані ефекти в разі програмування. Написано програму для моделювання процесів низькодозного рентгенівського опромінення для кристалів CdS.

Ключові слова: напівпровідник, дефекти, дифузія, радіаційно стимульоване впорядкування.

Питання взаємодії іонізуючого випромінювання з твердим тілом – одне з важливих у сучасній фізиці твердого тіла. Воно охоплює низку самостійних задач, пов'язаних з радіаційним дефектоутворенням, взаємодією радіаційних дефектів з домішками, радіаційно стимульованою зміною властивостей твердого тіла, дифузією домішок і дефектів, спричинених іонізуючим випромінюванням (підпорогових і надпорогових значень енергій), особливостями механізмів дифузії домішок у разі дії іонізуючих частинок різної природи.

Факторами, які зумовлюють деградацію напівпровідникових приладів, є генерація, трансформація та міграція дефектів кристалічної ґратки, тому експериментально з'ясовано, що одним з можливих методів поліпшення параметрів приповерхневої області та об'єму є опромінення малими дозами, яке супроводжується поліпшенням електрофізичних параметрів структур [1-3, 6] (так званий ефект заліковування дефектів). Сьогодні процеси радіаційно стимульованого впорядкування напівпровідникових кристалів маловивчені. Тому дослідження в цій галузі актуальні.

Сполуки типу A^2B^6 широко використовують для виготовлення напівпровідникових приладів. Саме ці сполуки є перспективними матеріалами в радіаційній техніці. Технологічні умови синтезу дають змогу отримувати кристали з необхідними і стабільними параметрами й характеристиками.

Ми мали на меті розробити програму для моделювання процесу радіаційно стимульованих змін параметрів напівпровідникових кристалів CdS і структур на їхній основі в разі опромінення низькими дозами рентгенівського випромінювання.

Радіаційне дефектоутворення в кристалах CdS. У напівпровідникових кристалах енергія екситонів менша від енергії зміщення атомів (E_{zm}). Крім того,

енергія електронно-діркової рекомбінації, як звичайно, сумірна з шириною забороненої зони E_g , а час автолокалізації екситона менший від періоду коливань ґратки. Тому енергія розпаду екситонів у сполуках типу A^2B^6 не є достатньою для утворення структурних дефектів. Реальнішим механізмом радіаційного дефектоутворення в напівпровідниках є іонізаційний.

Під впливом випромінювання відбувається іонізація і зміщення атомів з положень рівноваги, крім того, у разі опромінення великими дозами виникає коагуляція точкових дефектів, утворення макродефектів, дислокацій, пар, колодальних частин тощо.

У кристалах CdS дія рентгенівських та γ -квантів приводить до утворення структурних дефектів. Радіаційно стимульована дифузія кадмію і сірки відбувається під впливом рентгенівських променів підпорогових значень енергій і визначає процес радіолізу сполуки та агрегатизації компонент.

Процес радіаційного декоруння поверхні зразків зумовлений радіаційно-стимульованим виходом продуктів деструкції з об'єму вздовж структурних каналів типу дислокацій. Кадмій в аморфному стані накопичується в області виходу структурних недосконалостей поверхні завдяки дифузії кадмію вздовж дислокаційних "трубок". Коефіцієнт радіаційної дифузії Cd в CdS відповідає коефіцієнту теплової дифузії при 900 K [7]. Отже, радіаційне дефектоутворення і, зокрема, протилежний до нього процес (заліковування дефектів – упорядкування) мають визначальний вплив на електричні властивості кристалів.

Модельовання процесів зміни параметрів кристалів. Математична модель. Аналіз ефекту радіаційно стимульованого впорядкування в напівпровідниках A^2B^6 (зокрема CdS) потребує врахування їхніх особливостей, оскільки властивості чистих кристалів визначені ґратковими стехіометричними дефектами. Отримані експериментальні результати [2-4] дають нам змогу припустити, що зміни рухливості і провідності в низькотемпературній області пов'язані зі зміною концентрації рекомбінаційно-активних центрів, а саме Cd_i .

Для аналізу ефекту радіаційно стимульованого впорядкування було використали модифіковане рівняння дифузії

$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 N(x,t)}{\partial x^2} + G - \frac{N(x,t)}{\tau(t)}, \quad (1)$$

де $N(x,t)$ – концентраційний розподіл Cd_i , D^* - коефіцієнт дифузії Cd_i , G - швидкість генерації Cd_i , $\tau(t)$ - час життя Cd_i .

Для розв'язування цього рівняння необхідно задати початкові та граничні умови.

Оскільки дифузія Cd_i відбувається до стоків (дислокацій, вільних поверхонь тощо), то крайові умови будуть мати такий вигляд:

$$\begin{aligned} N(0,t) &= N_0 \exp(\alpha t), \\ N(a,t) &= N_0 \exp(\beta t), \end{aligned} \quad (2)$$

де $N(0, t)$, $N(a, t)$ - концентрація Cd_i на границях зразка; a - довжина зразка; N_0 - середня концентрація Cd_i ; α , β - сталі, які характеризують ефективність гетерування Cd_i на різних структурних дефектах. Як початковий розподіл $N(x, 0)$ використано нормальний розподіл Гаусса.

Відомо [4, 5], що в кристалічній структурі CdS є вісь шостого порядку симетрії (С). У випадку розколювання кристала перпендикулярно до цієї осі ми одержимо дві базисні поверхні, причому на одній буде надлишок Cd, а на іншій – S. У побудові моделі враховано внесок у радіаційностимульовану дифузію цих надлишкових атомів. Тому крайові умови мають вигляд

$$\begin{aligned} N(0, t) &= N_0 \exp(\alpha t) + N_{dCd}, \\ N(a, t) &= N_0 \exp(\beta t), \end{aligned} \quad (3)$$

де N_{dCd} - концентрація надлишкового Cd в приповерхневій області орієнтованого зразка.

Відомим є той факт, що коефіцієнт дифузії визначає швидкість вирівнювання концентрації, тоді як швидкість генерації та час життя визначають загальний рівень концентрації. Однак у випадку наведених вище граничних умов коефіцієнт дифузії також може впливати на загальний рівень концентрації.

Отже, в цій математичній моделі ефект радіаційно стимульованого впорядкування враховано як за часом життя дефектів $\tau(t)$, так і за коефіцієнтом дифузії D^* .

Фізична інтерпретація. В результаті моделювання процесів дифузії в напівпровідниках ми отримали залежності концентрації дефектів $N(x, t)$ від орієнтації зразка, часу життя дефектів до і після опромінення. Ці залежності ($N(x, t)$) дають змогу оцінити характер зміни концентраційного профілю з часом, зокрема спостерігати процеси дифузії дефектів (міжвузлового Cd_i) до вільних поверхонь та зміну загального рівня концентрації за рахунок генерації і рекомбінації. Також ми маємо змогу дослідити залежність концентраційного профілю зі зміною координати.

Вхідними параметрами для програми моделювання процесу дифузії дефектів у напівпровіднику взято такі значення:

- коефіцієнт дифузії $D^* = 10^{-16} \text{ м}^2 / \text{с}$ за нормальних умов і $D^* = 10^{-13} \text{ м}^2 / \text{с}$ у разі опромінення;
- швидкість генерації (так званого заліковування) дефектів у напівпровіднику в разі опромінення $G = 10^{16} \text{ м}^3$;
- середній час життя дефекту в кристалі без опромінення становить $\tau = 10^3 \text{ с}$;

- початковий розподіл $N(x,0)$ у вигляді нормального розподілу Гаусса

$$\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(N(x,0)-N_0)^2}{2\sigma^2}\right) \right], \text{ у якому середнє значення концентрації}$$

дефектів $N_0 = 10^{21} \text{ м}^{-3}$;

- товщина зразка $L = 7 \cdot 10^{-4} \text{ м}$;
- коефіцієнти в рівняннях крайових умов $\alpha = \beta = 1,7 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$;
- час експерименту визначений оператором (від 1000 до 8000 с, $t_{\text{екс}} = 3000 \text{ с}$ відповідає експозиційній дозі $D \sim 0,9 \text{ Кл/кг}$);
- товщина та концентрація шару на грані (0001), відповідно, $\delta a \approx 10^{-6} \text{ см}$ та $\approx 10^{20} \text{ м}^{-3}$.

Результати моделювання процесу дифузії дефектів без опромінення показані на рис. 1.

З рис. 1 видно, що без опромінення дифузія дефектів до вільних поверхонь не відіграє помітної ролі. Тут концентрація дефектів біля поверхонь мало відрізняється від об'ємної. Отже, на процес зміни концентрації дефектів може впливати тільки рекомбінація. Це можна пояснити термічним відпалом кристала за нормальних умов.

У випадку моделювання процесів під дією опромінення ми використовували той факт, що коефіцієнт дифузії збільшується приблизно на 2-3 порядки порівняно з коефіцієнтом термостимульованої дифузії. Також з експериментальних досліджень відомо, що концентрація дефектів у кристалі внаслідок радіаційно стимульованого впорядкування зменшується на 1,0-1,5 порядки.

Аналітичний вираз для $\tau(t)$ невідомий, відомий тільки сам хід залежності. На рис. 2 показано дозову залежність часу життя дефектів. На графіку видно чітке зменшення часу життя Cd_i на початковій ($D < 0,9 \text{ Кл/кг}$) стадії опромінення. У разі тривалості опромінення 21 с ($D = 0,9 \text{ Кл/кг}$) маємо мінімальне значення часу життя. Подальше збільшення поглинутої дози опромінення приводить до збільшення часу життя, а це означає, що ефективність процесу генерування радіаційних дефектів уже переважає над ефективністю “заліковування” структурних дефектів.

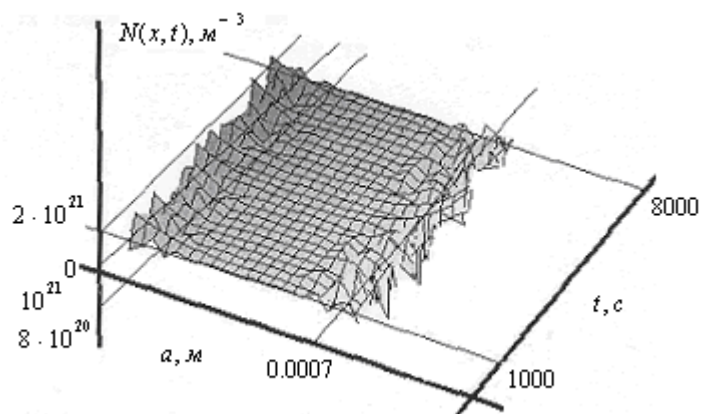


Рис. 1. Концентраційна залежність дефектів Cd_i без опромінення.

Результати моделювання процесу дифузії врахуванням радіаційно стимульованої дифузії Cd_i показані на рис. 3 , 4.

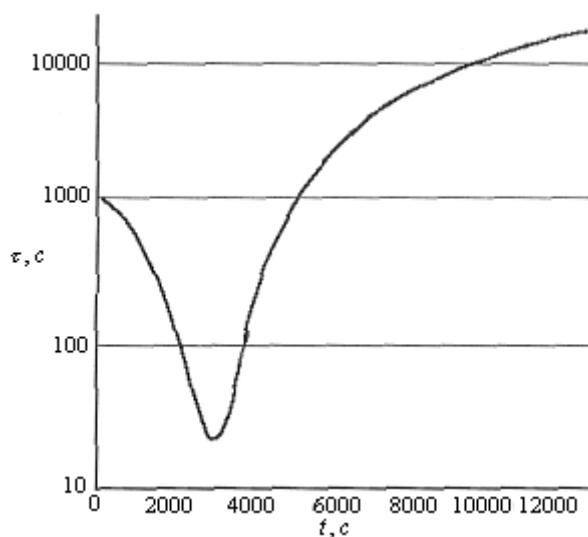


Рис. 2. Дозова залежність часу життя міжвузлових атомів кадмію в кристалі CdS.

Залежність, зображена на рис. 3, свідчить про значну зміну загального рівня концентрації дефектів з часом. На відміну від випадку, коли опромінення нема (див. рис. 1), у цьому разі простежуються значні відмінності в поведінці концентрації дефектів в об'ємі та в приповерхневому шарі. Виявляються як процеси генерації

дефектів, так і їхні рекомбінації, причому чисельним методом з'ясовано, що останнє переважає за малих та середніх часах життя дефектів (близько 1000–3000 с).

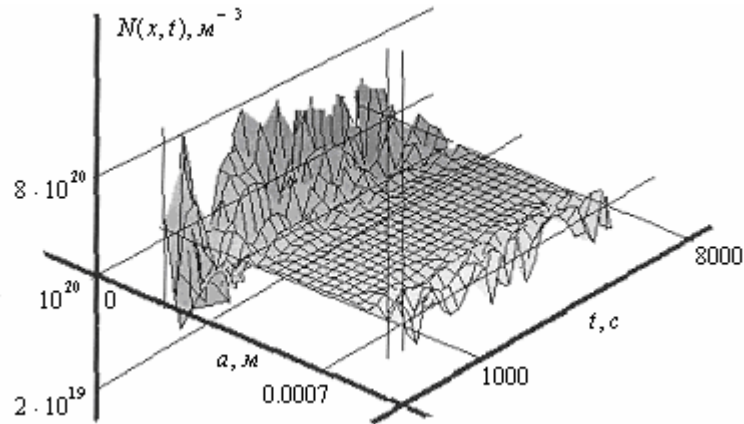


Рис. 3. Концентраційний розподіл дефектів (Cd_i) у неорієнтованому зразку.

Залежність концентраційного розподілу дефектів від часу їхнього життя добре корелює з результатами, показаними на рис. 2. Загальний рівень концентрації дефектів при $t < 3000$ с зменшується внаслідок значного зменшення часу життя дефектів (див. рис. 2). Подальше збільшення часу життя дефектів зумовлює зменшення впливу процесів рекомбінації над процесами генерації.

Концентрація дефектів досягає мінімуму ($N(x, t) = 2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$), що відповідає максимуму ефекту радіаційно стимульованого впорядкування.

На рис.4 показана залежність концентрації Cd_i дефектів з урахуванням початкового стану поверхні (її орієнтації). Ми опромінюємо грань (0001). Тобто уже існує початкова надлишкова концентрація Cd_i на поверхні, що, як видно, робить внесок у залежність часу життя. Концентрація дефектів слабо залежить від їхнього часу життя. Крім того, “заліковування” дефектної структури відбувається інтенсивніше, ніж у попередньому випадку.

І у разі орієнтованої поверхні опромінювання, і під час при розгляді безорієнтаційної поверхні ми отримали той ефект, що в об'ємі концентрація дефектів зменшується значно слабше, ніж біля поверхні. Це пояснюють внеском процесу радіаційно стимульованої дифузії в ефект упорядкування структури в приповерхневих областях кристала. Оскільки концентрація дефектів у приповерхневій області є меншою, ніж в об'ємі, то до поверхні починають дифундувати з об'єму дефекти. Це спричинює вирівнювання концентрацій поверхні й об'єму напівпровідника.

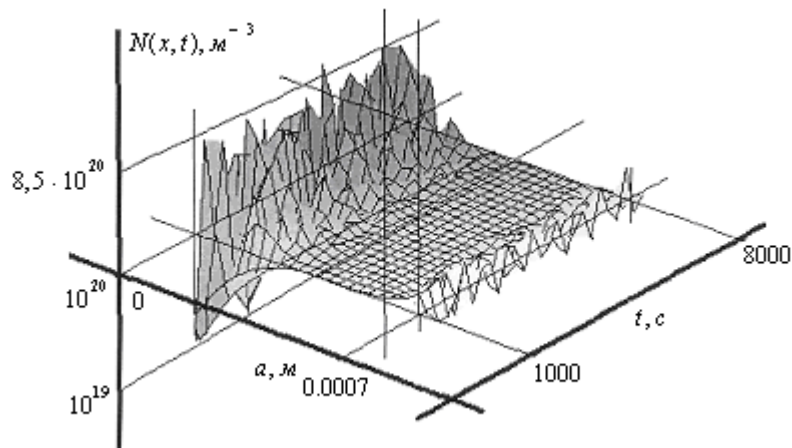


Рис. 4. Концентраційна залежність дефектів у разі опроміненні орієнтованої поверхні (0001).

У разі зняття опромінення та наступного відпалу кристала ми одержуємо в цілому “збіднений” на дефекти зразок.

1. Джафаров Т. Д. Радиационно-стимулированная диффузия в полупроводниках. М.: Энергратомиздат, 1991. 278 с.
2. Борковська О. Ю., Груша С. А., Дмитрук Н. Л. и др. Структурно-примесное упорядочение под воздействием малых доз проникающей радиации // Журн. физики. 1985. Е. 55. Вип. 10. С. 1977-1982.
3. Болотов В. В., Коротченко В. А., Мамонтов А. П. и др. Радиационные эффекты в полупроводниках при малых дозах облучения частицами // Физ. и техн. полупроводников. 1980. Т. 14. Вип. 11. С. 2257-2260.
4. Корсунская Н. Е., Торчинская Т. В., Маркевич И. В. и др. Стимулированная УФ-облучением диффузия дефектов в CdS // Укр. физ. журн. 1983. Т. 26. Вип. 7. С. 851-854.
5. Физика соединений A^2B^6 / Под ред. А. Н. Гергиани, М. К. Шейкмана. М.: Наука, 1988. 320 с.
6. Павлик Б., Цибуляк Б., Ключан О. Радіаційно-індуковане поліпшення електрофізичних параметрів кристалів та поверхнево-бар'єрних структур на їхній основі // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. фіз. 2000. Вип. 33. С. 139-144.
7. Стародубцев В. С., Кив А. Е. Механизм образования радиационных нарушений в неметаллических твердых телах // Физика твердого тела. 1967. Т. 9. Вип. 3. С. 872-878.
8. Самарський А. А., Гулин А. В. Численные методы. М.: Наука, 1989. 429 с.
9. Коссак О., Тумашов О., Коссак О. Методи наближених обчислень. Л.: Бак, 2003. 166 с.

**RADIATION-STIMULATED PROCESSES MODELING OF CHANGING CdS
CRYSTAL'S PARAMETERS IN THE AREA OF LOW LEVEL RADIATION**

B. Pavlyk, M. Lyshak, O. Klochan

*Lviv Ivan Franko National University,
Tarnavskogo Str., 107, Lviv, 79017, Ukraine*

It is shown, that for an explanation of effect of radiation-stimulation ordering it is necessary to take into account time dependence of time life of defects. The physical model which explains observably (notice) effects at programming is offered. The program for modeling processes of a low-level x-ray irradiation for crystals CdS is written.

Key words: semiconductor, defects, diffusion, radiation-stimulation ordering.

Стаття надійшла до редколегії 31.10.2003

Прийнята до друку 12.05.2004