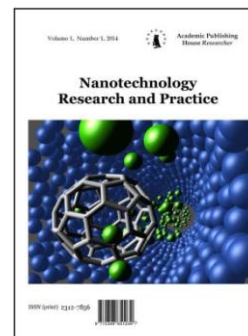


Copyright © 2014 by Academic Publishing House *Researcher*

Published in the Russian Federation
Nanotechnology Research and Practice
Has been issued since 2014.
ISSN: 2312-7856
Vol. 4, No. 4, pp. 213-229, 2014

DOI: 10.13187/ejnr.2014.4.213
www.ejournal13.com



UDC 539.124.6:621.315.592

Identifying the Nature of Semiconductor's Dislocation Density by Positron-Annihilation Spectroscopy Method. Overview

^{1, 2} Evgeny P. Prokop'ev
¹ Sergei S. Evstaf'ev
¹ Sergei P. Timoshenkov
¹ Boris M. Simonov
² Viktor I. Grafutin
¹ Aleksei S. Timoshenkov
¹ Igor M. Britkov
¹ Oleg M. Britkov

¹ Moscow State Institute of Electronic Technology (Technical University), Russian Federation
124498, Москва, г. Зеленоград, проезд 4806, д. 5

² Kurchatov Institute, Institute of Theoretical and Experimental Physics, Russian Federation
E-mail: eppropkiev@mail.ru 5

Abstract

The key methods for positron annihilation study is: a) identifying spectrum of angle distribution of annihilation photons (URAF) $I(\theta)$; the study of temporary distribution spectrums of annihilation photons (VRAF), characterized by intensity I_i and lifetimes τ_i ; b) Doppler widening of annihilation line (DUAL), characterized by S parameter – is a correlation of central part of annihilation photopeak to the distribution area of annihilation photopeak. The VRAF method provides data on electronic density where the annihilation positron is located, and URAF and DUAL methods provide data on distribution of impulses and chemical composition of the environment, surrounding nano objects in the area of annihilation. The overview shows that these methods allow to identify the nature and the density of dislocations in semiconductors, as the effective centers for positrons capturing are negatively-charged and neutral dislocations.

Keywords: semiconductors; by positive annihilation method of spectroscopy.

Введение

Ранее было обнаружено, что в *Si* и *Ge* с бездефектными, прямолинейными отрезками дислокаций связаны одномерные электронные зоны, ответственные за целый ряд интересных физических эффектов, например, электродипольный спиновый резонанс, спин-зависимую рекомбинацию на дислокациях, дислокационную фотолюминесценцию (см., например, Данные Интернет: ПерсТ 15_16.mht). Хотя эти эффекты были интересны, прежде всего, с фундаментальной точки зрения, скоро стало ясно, что дислокации в активной зоне электронных приборов сильно влияют на их характеристики. С задачей избавиться от дислокаций в активном слое кремниевых "чипов" удалось справиться. Фактически

научились получать бездислокационный кремний и избегать генерации дислокаций в процессе проведения технологических операций.

По данным, например, Интернет современная новая волна интереса к дислокациям вызвана активностью сразу в трех направлениях исследований. *Во-первых*, оказалось, что протяженные дефекты в ряде случаев просто необходимы. И нужно научиться вводить их в кремний управляемым образом. Этого требует сегодняшний уровень технологии кремниевых интегральных схем. Современная микроэлектроника немислима без применения геттерирования, т.е. очистки рабочего слоя кремниевых пластин от вредных примесей (*Cu, Au, Fe, Ni*) путем их "отсасывания" в глубину объема пластины или на ее обратную сторону, а также контроля количественных и качественных технологических параметров парогазовых сред. Установлено, что дислокации и некоторые другие протяженные дефекты (например, преципитаты SiO_2) являются прекрасными геттерами. Поэтому они специально создаются в нерабочих областях пластин либо путем тщательно подобранной последовательности термообработок, либо специальными имплантациями с последующими термообработками, либо некоторыми более специфическими методами. Таким образом, протяженные дефекты используются как очень эффективные сборщики вредного мусора - паразитных примесей. Такое геттерирование сейчас повсеместно используется разработчиками и производителями интегральных схем. Физика процессов геттерирования еще до конца не выяснена. Например, неизвестны элементарные акты и реакции, приводящие к захвату примесей в ядра дислокаций, роль в этом дислокационных дефектов, энергии связи примесей в ядрах дислокаций. Эти проблемы сейчас активно исследуются. Дислокации могут помочь в решении еще одной задачи современной кремниевой электроники. Речь идет о создании кремниевых светодиодов для оптоэлектронных коммуникаций внутри кремниевых чипов. Здесь наиболее интенсивно развиваются два подхода - 1) использование внутренних излучательных переходов некоторых вводимых в кремний примесей (например, *Er*) и 2) использование нанокристаллов кремния в диэлектрической матрице (например, "нанопористого" кремния или нанокластеров кремния в SiO_2). Пока изготовленные кремниевые диоды недостаточно эффективны. Возможно, ситуацию изменят дислокации, "правильно дислоцированные" в *Si*. Известно, что дислокации в кремнии дают четыре полосы люминесценции. Одна из полос - наиболее многообещающая, лежит в области $\lambda \sim 1.5$ мкм. Что касается проблемы генерации дислокаций в строго определенном месте, она относительно легко решается и даже несколькими способами; генерация дислокационных полупетель происходит вокруг преципитатов некоторых примесей (например, того же *Er*), созданных локальной имплантацией; при наращивании на поверхности кремния слоя *Si-Ge* (из-за различия постоянных решетки этих материалов) на границе рождаются т.н. *misfit* дислокации. *Во-вторых*, резко вырос интерес к широкозонным полупроводникам - нитриду галлия, карбиду кремния - для создания "синих" светодиодов и мощных СВЧ транзисторов. Большой спрос на последние задает быстрое развитие телекоммуникаций - сотовые телефоны, спутниковая связь, минирадарные системы с электронным сканированием. По самой природе этих материалов дефектов там - множество. Их поведение и свойства нужно изучать, понимать их влияние на параметры приборов. Нужно научиться целенаправленно модифицировать электронные свойства дефектов. СВЧ *GaN* транзисторы формируют на подложках из монокристаллического *SiC*. Это заставляет РФ возобновить работы по выращиванию этих монокристаллов, так как для работ по СВЧ транзисторам приходится покупать монокристаллические подложки за рубежом, а это - дорого. Сейчас предприняты попытки реанимировать процессы выращивания монокристаллов *SiC* и *GaN*. *В-третьих*, изучение свойств дислокаций в кремнии и влияния на них различных примесей потребовалось (и это может быть самое неожиданное) для современной энергетики. Речь идет о солнечных батареях ("фото-вольтаических элементах"). Сейчас солнечная энергетика переживает настоящий бум. Производство солнечных батарей растет экспоненциально. В 1997 г. в мире производилось солнечных батарей на суммарную мощность 100 МВт/год, и тогда эта цифра казалась огромной. А в 2000 г. батарей производилось уже на мощность свыше 370 МВт/год, и эта цифра растет с каждым годом. При больших объемах производства важным становится не столько эффективность самой солнечной батареи,

сколько стоимость батарей в пересчете на производимый ими кВт·час энергии. Поэтому, когда начался бум солнечной энергетики, то большую актуальность приобрело изучение возможностей дешевого поликристаллического кремния. Этот дешевый кремний содержит большое число дислокаций (как в зернах, так и в междוזеренных границах), а также различных примесей. Поэтому исследование электронных свойств реальных дислокаций, собравших на себя различные примеси, а также способов управления этими свойствами стало актуальной практической задачей. Надо сказать, что раньше основной акцент ставился на исследовании "чистых" дислокаций, а вот свойства "грязных" дислокаций были исследованы слабо. Так что это для физиков - совсем новый, весьма специфичный объект исследования. Ведь свойства примесного атома, попавшего в ядро дислокации, могут сильно отличаться от свойств этого атома в объеме кристалла. Необходимы новые подходы и методы исследования таких дислокаций.

Важными вопросами, которые можно решать с помощью метода позитронной аннигиляционной спектроскопии (ПАС), являются исследования механизмов и динамики возникновения, превращения и исчезновения различного типа позитронных состояний в физике твердого тела и радиационной физике материалов, используемых в атомной и электронной промышленности [1-36], на различных стадиях технологического процесса их получения. В экспериментах по аннигиляции используются радиоактивные β^+ -изотопы (^{22}Na , ^{64}Cu и т.д.), испускающие позитроны в интервале энергий от нуля до 700 кэВ; поэтому средние пробеги позитронов в различных материалах, как правило, не превышают величину 150 мкм. Это означает, что подавляющая часть позитронов аннигилирует в приповерхностных слоях исследуемых материалов. В настоящее время развит также новый метод исследования поверхностных свойств твердого тела с помощью медленных позитронов ($E \leq 7$ кэВ) на глубины ≤ 1 мкм [2]. Основными методами изучения позитронной аннигиляции являются: а) определение спектров углового распределения аннигиляционных фотонов (УРАФ) $I(\theta)$; б) изучение спектров временного распределения аннигиляционных фотонов (ВРАФ), характеризуемых интенсивностями I_i и временами жизни τ_i ; в) измерение доплеровского уширения аннигиляционной линии (ДУАЛ), характеризуемое линейным параметром S - отношением центральной части аннигиляционного фотопика к площади всего распределения аннигиляционного фотопика.

Метод ВРАФ дает сведения об электронной плотности в месте аннигиляции позитрона, а методы УРАФ и ДУАЛ дают информацию о распределении импульсов электронов и о химическом составе среды, окружающей нанообъекты, в месте аннигиляции. Имеются две группы этих методов ПАС. В первой группе используются медленные позитроны, позволяющие исследовать приповерхностные слои на небольших глубинах. Во второй группе используются быстрые позитроны, проникающие в исследуемый объект на большие глубины ≥ 50 мкм и дающие информацию о типе, концентрации и распределении дефектов во всем объеме твердого тела. Все эти методы уже получили достаточно широкое применение для исследований в современном материаловедении, в частности в атомном и электронном материаловедении (см., например, [1-15]). Настоящая работа посвящена исследованиям методом позитронной аннигиляционной спектроскопии (ПАС) дислокаций в полупроводниках.

Определение природы и плотности дислокаций в полупроводниках методом ПАС

Впервые вопрос о влиянии пластической деформации (наведение дислокаций в монокристаллических образцах полупроводников под влиянием механических воздействий) на спектры УРАФ в германии и кремнии был рассмотрен в [16]. Как известно [17], сведения об изменениях, происходящих при механической обработке в зонной структуре германия и кремния, основаны на исследованиях оптического поглощения (вблизи края спектра поглощения). Полученные результаты указывают на изменение края собственного поглощения Ge , InSb , GaAs , подвергшихся термической обработке. Установлено [18,19], что при известных условиях Ge и Si могут быть пластически деформированы. Удобным методом введения дислокаций оказался метод пластического изгиба, а также растяжения,

сжатия и кручения. Максимальная плотность дислокаций, которые могут введены в полупроводники при пластическом изгибе, составляет около 10^8 см^{-2} .

Обработка поверхности полупроводников (механическая шлифовка, полирование, излом и т.д.) приводит к появлению сильно деструктурированного поликристаллического слоя толщиной до десятков мкм [20] с большой плотностью дислокаций. Зонная структура этого слоя может резко меняться и может привести к образованию особых зон, которые проявляют себя как примесные зоны. Для *Ge* обнаружена одна зона, для сложных полупроводников *InSb* и *GaAs* - две [16].

Следует отметить, что разорванные валентные связи в деформированных образцах способны захватывать электроны, что может привести к образованию значительного числа дырок в материале *p* – типа и, следовательно, увеличить вероятность аннигиляции позитронов с локализованными валентными электронами, а также привести к изменению спектров УРАФ. Исследования методом УРАФ были приведены на монокристаллах *Ge* и *Si* с ориентацией (111) с плотностью дислокаций $N_d \approx 10^3 \text{ см}^{-2}$ в исходном состоянии и более высокой – в деформированном для двух серий образцов: а) деформированных методом изгиба и б) методом шлифовки, когда образуется высокая плотность дислокаций ($\approx 10^{10} \text{ см}^{-2}$) в поверхностном слое до 100 мкм. Изгиб кремния проводился при температурах 690 и 720 °С с нагрузкой $\tau_l = 5$ и 6 кГ/мм² соответственно. Распределение плотности дефектов, вводимых шлифовкой, определялось по изменению времени жизни возбужденных неравновесных носителей тока [21] и представлено на рис. 1.

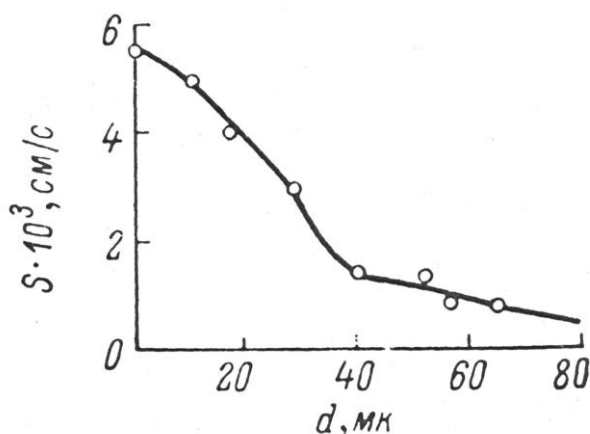


Рис. 1. Зависимость величины S , обратной времени жизни возбужденных состояний, от глубины нарушенного слоя d в *Ge*

Здесь приведена зависимость величины $S = 1/\tau$ от глубины слоя (τ - время жизни возбужденных неравновесных носителей). Из этого рисунка видим, что основная часть дефектов деформации располагается в слое до 50 мкм. В *Ge* позитрон может проникать на глубины до 200–300 мкм [22], но подавляющая их часть исчезает в слое с высокой плотностью дислокаций.

На рис. 2 представлены спектры УРАФ в *Ge*, деформированном методом изгиба, и в исходном состоянии с низкой плотностью дислокаций. Как видим из рис. 2, эти спектры практически неразличимы. Аналогичное явление наблюдается в *Si*, деформированном двумя указанными способами.

Отсутствие влияния пластической деформации на спектры УРАФ в *Ge* и *Si* авторы [16] объясняют взаимным насыщением незаполненных валентностей соседних атомов с образованием валентных связей. При этом концентрация свободных носителей заряда не меняется.

В работах [23, 24] исследовались временные спектры деформированных полупроводников *GaAs* и *Ge*. Остановимся вначале на образцах *GaAs*.

В полупроводниках со структурой цинковой обманки (*InSb* и *GaAs* и т.д.) имеются два вида 60° дислокаций, которые обусловлены тем, что границы обрыва атомных плоскостей содержат только один вид атомов. *GaAs* поэтому имеет *Ga* - дислокации и *As* - дислокации. Найдено, что эти два вида дислокаций передвигаются с различными скоростями [25]. Это обусловлено различием количества зарядов, накапливаемых этими дислокациями. Поэтому следовало ожидать, что позитронные аннигиляционные спектры деформированных образцов *GaAs* могут содержать в себе информацию об этих зарядах на обоих видах дислокаций.

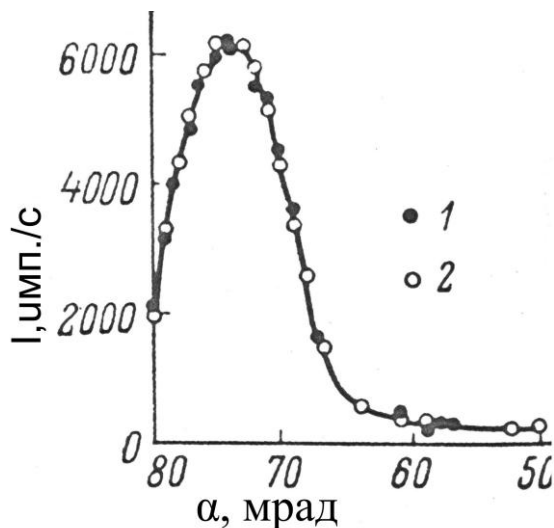


Рис. 2. Угловые распределения аннигиляционных фотонов в Ge: в исходном (1) и в деформированном образцах (2)

Концентрация носителей в исследуемых образцах *GaAs* составляла величину $\approx (1 \div 5) \cdot 10^{16}$ см⁻³ при комнатной температуре. Главной примесью являлся кремний, что соответствовало образцам *n* - типа. Образцы для изгиба изготавливались на стандартной установке методом резки полупроводников с плоской поверхностью. Изгибы вдоль оси, параллельной направлению (111), соответствовали стереографическому треугольнику. Радиус кривизны составлял 11 и 6 мм. Последние имели ширину, равную половине прежней ширины образца. С целью снятия поверхностного деформированного слоя использовалось химическое полирование смесью $HNO_3(3) - HF(1) - H_2O(2)$. Затем образцы деформировались на стандартной установке с резистивным нагревом поверхности при 600 °С в атмосфере аргона. После выгрузки образцы отжигались 1 час при температуре 600 °С с целью осуществления процесса аннигиляции дислокаций с противоположными зарядами и полной полигонизации наведенных дислокаций, а также отжига точечных дефектов. С помощью травления было установлено, что образцы имели однородную деформацию. Изогнутые образцы стравливались смесью $HF(5) - H_2O_2(3) - H_2O(15)$ в течение 15 с и при этом обнаруживались «ямки» с плотностью дислокаций от $2,1 \cdot 10^7$ до $3,3 \cdot 10^7$ см⁻².

Измерения временных спектров ВРАФ производились в криостатах, где температура изменялась от 77 до 350 °С. Временное разрешение установки составляло 0,36 нс. Временные спектры анализировались с помощью ЭВМ в рамках нелинейного метода наименьших квадратов. При этом находили следующие параметры $\tau_1, \tau_2, \tau_3, I_1, I_2, I_3, I_4$, где I_4 - интенсивность фона случайных совпадений и обратного рассеяния. Результаты измерения времен жизни τ_i и соответствующих интенсивностей I_i даны в табл.1 и 2.

В табл.2 приведены времена жизни позитронов и интенсивностей ($\mu_i = 1/\tau_i^{-1}$, k - константа скорости захвата позитронов ловушками, а $\lambda_1 = \mu_1 - k$).

Таблица 1

Времена жизни τ_i и соответствующие интенсивности I_i в деформированных полупроводниках GaAs

Образец	Т, К	ρ , см ⁻²	τ_1	τ_2	τ_3	I_1	I_2	I_3
			нс			%		
Недеформ.	Комн. 77	$4.1 \cdot 10^4$	0.236 0.226	1.05 0.80	16.9 16.0	98.4 98.3	1.3 1.4	0.23 0.40
Ga I	Комн.	$2.1 \cdot 10^7$	0,235	0,57	4,05	84,3	15,3	0,44
As I	Комн. 343 77	$2.1 \cdot 10^7$	0,209 0,208 0,202	0,49 0,48 0,45	9,10 9,10 3,80	78,9 75,5 82,3	21,0 24,4 17,6	0,10 0,10 0,10
Ga II	Комн.	$3.3 \cdot 10^7$	0,218	0,52	3,37	71,6	27,5	0,90
As II	Комн.	$3.3 \cdot 10^7$	0,223	0,51	3,20	66,8	32,2	1,00

Таблица 2

Константы скорости захвата позитронов ловушками k в деформированных полупроводниках GaAs ($\mu_i = 1/\tau_i^{-1}$, а $\lambda_1 = \mu_1 - k$)

Образец	Т, К	ρ , см ⁻²	μ_1	μ_2	μ_3	k	λ_1
			нс ⁻¹				
Недеформ.	Комн. 77	$4.1 \cdot 10^4$	4,24 4,42	0,95 1,25	0,06 0,06	0,043 0,044	4,20 4,38
Ga I	Комн.	$2,1 \cdot 10^7$	4,25	1,75	0,25	0,382	3,87
As I	Комн. 343 77	$2,1 \cdot 10^7$	4,78 4,81 4,95	2,04 2,08 2,22	0,11 0,11 0,26	0,575 0,666 0,480	4,21 4,14 4,47
Ga II	Комн.	$3,3 \cdot 10^7$	4,59	1,92	0,30	0,734	3,86
As II	Комн.	$3,3 \cdot 10^7$	4,48	1,96	0,31	0,812	3,67

Из этих данных следует, что τ_1 и I_1 уменьшаются с ростом плотности дислокаций. В недеформированном образце τ_2 намного больше, чем τ_2 в деформированных образцах, но интенсивность I_2 очень мала. В деформированных образцах величины τ_2 практически постоянны, но I_2 возрастает с ростом деформации. Величины τ_3 намного больше величин τ_1 и τ_2 , но величина I_3 пренебрежимо мала. В рамках модели ловушечного центра [26] скорость захвата $k = I_2(\tau_1^{-1} - \tau_2^{-1})$. Величины k при комнатной температуре и 77 К также приведены в табл.1 и 2. Видим, что величины k уменьшаются с понижением температуры. Значения k для As - дислокаций намного больше значений k для Ga - дислокаций.

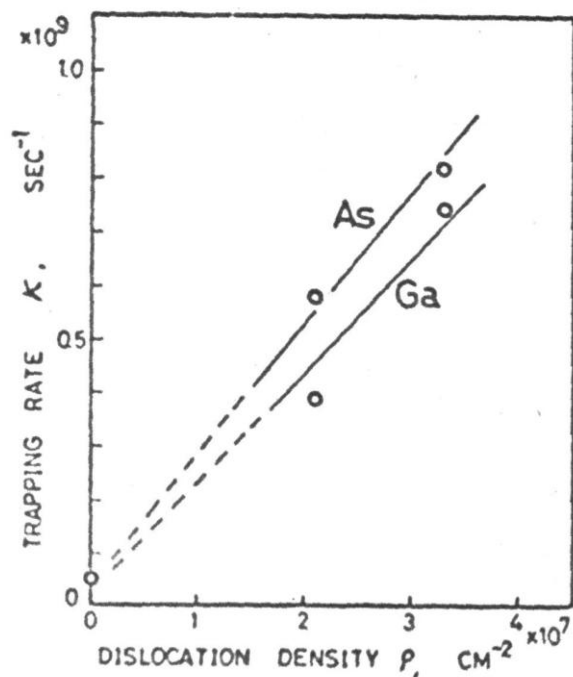


Рис. 3. Скорости захвата позитронов Ga- и As – дислокациями при комнатной температуре

На рис. 3 приведены зависимости k от плотности Ga - дислокаций и As - дислокаций. Следует, что наблюдается почти линейная зависимость между скоростью захвата k и плотностью дислокаций ρ . Из этих данных по формуле $k = \rho v w$ (v - скорость термализованного позитрона ($v = (8kT/\pi m)^{1/2}$, а w - поперечное сечение захвата) могут быть оценены величины w . Для As - дислокаций: $w = 2.2 \cdot 10^2 \text{ \AA}$; для Ga - дислокаций: $w = 2.9 \cdot 10^2 \text{ \AA}$.

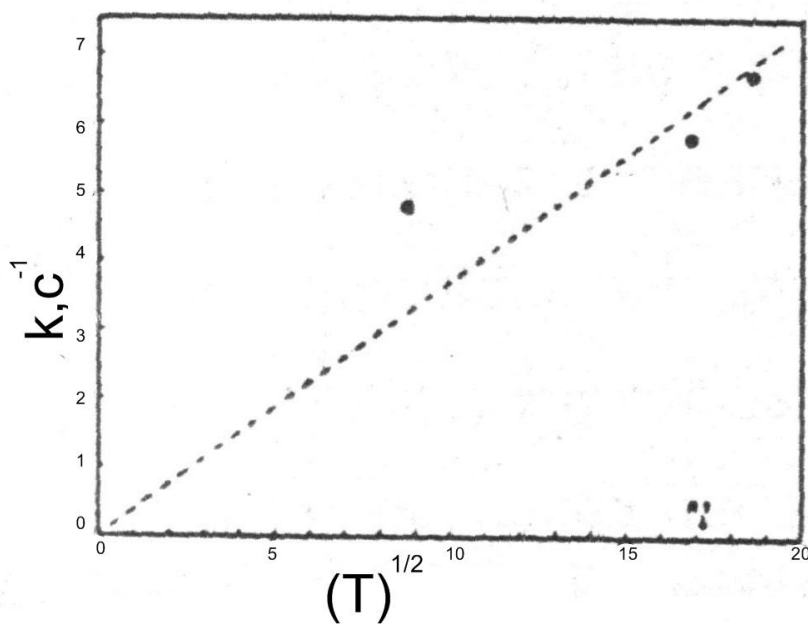


Рис. 4. Температурная зависимость скорости захвата позитронов As – дислокациями

На рис. 4 показана зависимость величины k от температуры ($T^{1/2}$) в $GaAs$ с As - дислокациями. Видим, что зависимость величины k является одной из характерных черт временных спектров деформированных образцов $GaAs$, не свойственных, например, кристаллам, Al_2O_3 , KI и Si .

Обсуждение полученных результатов связано с анализом τ_i и I_i . Время жизни τ_1 обычно приписывается аннигиляции позитронов в матрице кристалла, а времена жизни τ_2 и τ_3 связываются с аннигиляцией позитронов на дефектах. Согласно ловушечной модели некоторая часть позитронов захватывается дефектами и аннигилирует из связанных состояний. Но данная модель, однако, не присуща всем веществам, так как существующая пропорциональная зависимость между τ_1 и τ_2 означает, что эти две компоненты I_1 и I_2 имеют одинаковую природу [27,28]. Здесь предполагается, что полученные результаты относятся к модели позитронов, захватываемых дислокациями (а может и позитрония). При этом допускается, что позитроны после термализации аннигилируют в бездефектной матрице со скоростью λ_1 , а некоторая часть из них захватывается дислокациями со скоростью k , пропорциональной их плотности. Пусть μ_2 - скорость в таких связанных состояниях. Тогда, если пренебречь процессами «освобождения» позитронов из связанных состояний, можно получить $N(t)$ - число позитронов, аннигилирующих в момент времени t

$$N(t) = N(0)[(1-\alpha)\exp(-\mu_1 t) + \alpha \exp(-\mu_2 t)], \quad (1)$$

где величина $N(0)$ при $t=0$ характеризует общее число термализованных позитронов; $\mu_1 = \lambda_1 + k$; $\alpha = k(\mu_1 - \mu_2)^{-1}$, $\mu_1 = \tau_1^{-1}$, $\mu_2 = \tau_2^{-1}$; $1-\alpha = I_1$ и $\alpha = I_2$. Эти величины приведены в табл.1 и 2. Согласно ловушечной модели τ_2 не должно зависеть от концентрации дефектов. В недеформированных образцах, где $\rho = 4,1 \cdot 10^4$ см², τ_2 больше, чем в других образцах. По-видимому, в этом случае компонента со временем жизни τ_2 определяется другой моделью, а не моделью ловушек. Для I_2 в недеформированных образцах не наблюдается ее уменьшение с ростом температуры. 60° дислокации в полупроводниках имеют неспаренные электроны, появляющиеся в результате разрыва химических связей на конце наружной стороны плоскости. Для описания принимается модель Рида [29]. В образцах n-типа «линии» с разорванными связями вдоль дислокации принимают электроны и получают отрицательно заряженными. Следовательно, дислокацию можно считать ориентированно заряженной нитью (линией). Отрицательно заряженная линия отталкивает электроны проводимости и образует цилиндрически заряженную область около дислокации. Радиус R этого цилиндра может быть определен из закона сохранения зарядов. Тогда, если пренебречь носителями заряда в цилиндрической области, получаем выражение для R

$$\pi R^2 (N_d - N_a) = f / c \quad (2)$$

Здесь N_d и N_a - концентрации донорных и акцепторных примесей соответственно; f - доля разорванных связей; c есть расстояние между разорванными связями. Внутри области пространственного заряда электростатический потенциал позитрона уменьшается в направлении к дислокации. Если $R \gg a = c/f$, то потенциал позитрона в поле отрицательно заряженной цилиндрической области с вертикальной положительно заряженной областью в центре цилиндра дается выражением

$$\psi(r) = \frac{e^2}{\varepsilon a} \left(2 \ln \frac{r}{a} + \frac{r^2}{R^2} - 1 \right) \quad (3)$$

где $a \leq r \leq R$ есть расстояние от дислокации, а ε - диэлектрическая проницаемость. Снаружи области пространственного заряда цилиндра $\psi = 0$. Схематическое представление области пространственного заряда иллюстрируется на рис. 5 (7.21).

На рис. 6 показан потенциал вида (3) для $N_d - N_a = 3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $c = 4 \text{ \AA}$ и $\varepsilon = 10,2$, но с неизвестным параметром f , характеризующим занятость валентных связей. С другой стороны сечение захвата W позитронов ловушками с этим потенциалом может быть получено из экспериментов. Эксперименты показывают, что позитрон захватывается, если он проникает в цилиндрическую область около дислокации радиуса $r = W/2$, меньшего R . Позитрон, однако, не может связаться до тех пор, пока его кинетическая энергия не будет передана в окружающее пространство. Наиболее вероятный механизм передачи энергии обусловлен возбуждением электрона из валентной зоны в более высокие энергетические состояния, такие как дно зоны проводимости или на донорные уровни. Этот процесс требует энергии, равной 1,45 эВ. Термализованные позитроны имеют кинетическую энергию равную $\frac{3}{2}kT$ или 0,025 эВ при комнатной температуре. Но в связанном состоянии позитрон ускоряется и его кинетическая энергия достигает 1,45 эВ при $r = W/2$, Это подтверждает факт того, что глубина потенциальной ямы при $r = W/2$ равна 1,45 эВ. Из этого условия доля занятости f , определяемая по методу (рис. 7) равна $f = 0,65$ для Ga- и $f = 0,45$ для As- дислокаций (на рис. 7 это показано пунктирной линией). В заключение авторы [23] отмечают, что предложенный механизм может иметь и позитрониевую природу.

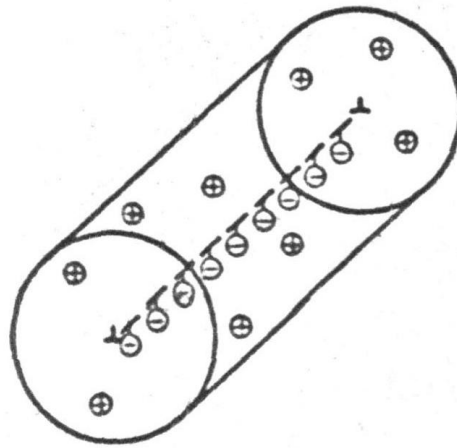


Рис. 5. Цилиндрическая область пространственного заряда вдоль 60° дислокации в полупроводнике n-типа /модель Рида [305]

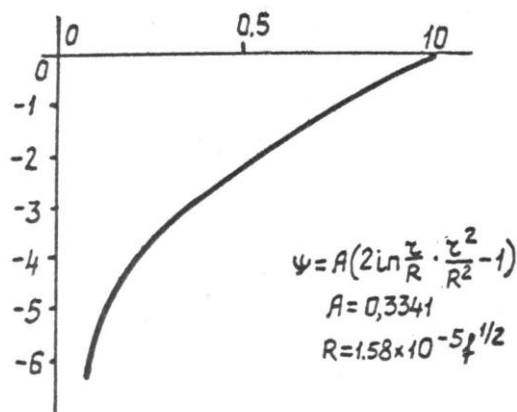


Рис. 6. Потенциальная энергия позитрона в области пространственного заряда

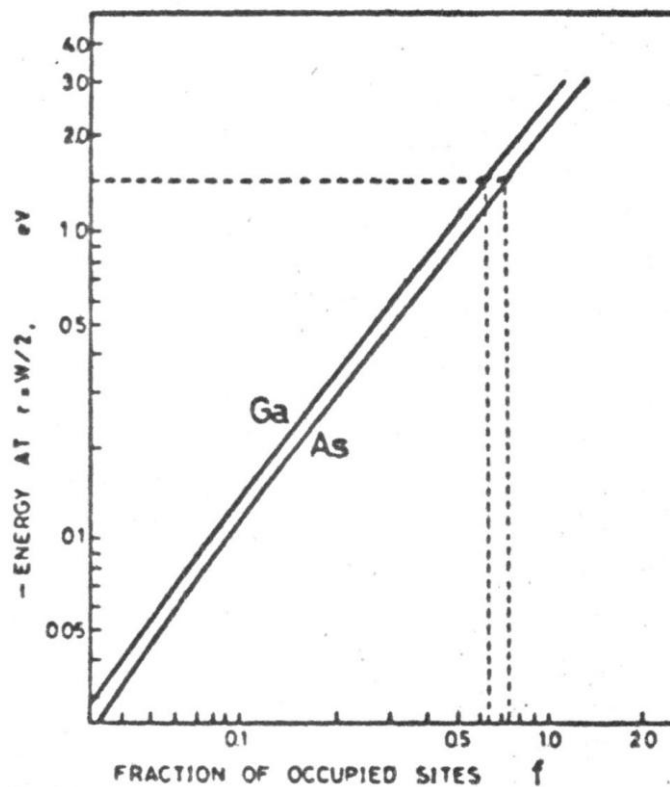


Рис. 7. Соотношение между степенью занятости f разорванных связей и глубиной потенциальной ямы позитрона при $r = w/2$ для Ga – и As-дислокаций. Пунктирные линии указывают величину f , соответствующую глубине потенциальной яме 1,45 эВ

Аналогичное исследование деформированных образцов германия методом ПАС было выполнено в [24]. В *Ge*, так же как и в *GaAs*, 60° дислокации могут служить акцепторами или донорами электронов, В результате этого дислокации становятся заряженными, а величина f зависит от от типа образца *Ge*. Из измерений эффекта Холла известно, что в *Ge* р-типа плотность носителей тока уменьшается при деформации, а степень занятости разорванных связей составляет несколько % при комнатной температуре. В *Ge* n - типа подобные изменения не наблюдались [30,31]. С другой стороны найдено, что в *Ge* n - и р-типа скорости движения (скольжения) дислокаций различны [32]. Это обстоятельство обусловлено различием зарядов на дислокациях, а следовательно временные спектры

распада в *Ge* должны зависеть от свойств дислокаций. Ориентации и главные индексы исследуемых образцов германия показаны на рис. 8.

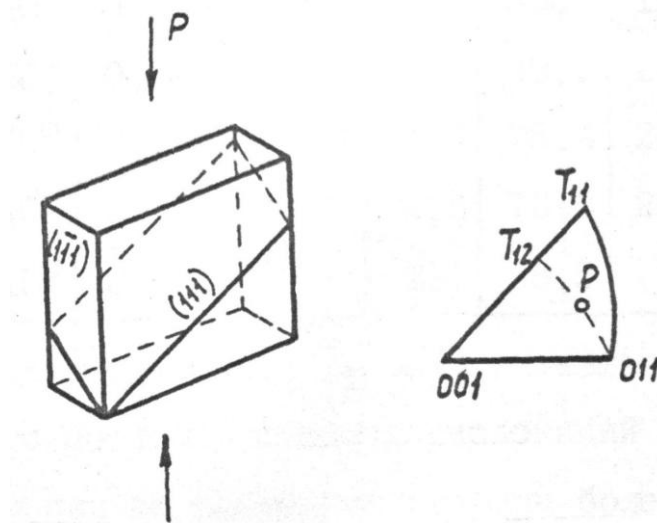


Рис. 8. Ориентации и главные индексы плоскостей в образцах германия

Размеры образцов германия были следующими: $5 \times 8 \times 10$ мм³. Для того, чтобы увеличить плотность дислокаций образцы деформировались в направлении *P*, показанного для стереографического треугольника на рис. 8. Деформация производилась на стандартной установке с резистивным нагревом в вакууме при 600 °С. После выгрузки образцы отжигались в течение часа для удаления точечных дефектов. Деформированные образцы стравливались в течение 1 мин, а плотность дислокаций определялась затем методом электронной микроскопии (метод Cr(C реплик)). Измерения временных спектров проводились на стандартной установке с разрешением 0,36 нс. Результаты измерений τ_i и I_i для образцов *Ge* приведены в табл.3.

Таблица 3

Времена жизни позитронов в германии (290 К)

Образец	$\rho, \text{см}^2$	$\tau_i, \text{нс}$			$I_i, \%$			c^{-1} k
		τ_1	τ_2	τ_3	I_1	I_2	I_3	
<i>Ge</i> №0	$3.4 \cdot 10^3$	0.173	0.330	2.4	83.7	16.0	0.2	0.44
№1	$8.2 \cdot 10^7$	0.175	0.353	3.5	85.4	14.4	0.2	0.42
№2	$3.5 \cdot 10^8$	0.163	0.324	2.6	74.5	25.2	0.3	0.77
№3	$7.9 \cdot 10^8$	0.154	0.307	2.0	60.0	39.6	0.4	1.28
<i>Ge</i> P0	$3.5 \cdot 10^3$	0.173	0.316	2.2	83.2	16.5	0.3	0.43
P1	$2.0 \cdot 10^8$	0.174	0.339	2.7	85.0	14.7	0.3	0.41
P2	$2.7 \cdot 10^8$	0.165	0.316	2.3	78.4	21.1	0.4	0.61
P3	$9.0 \cdot 10^8$	0.158	0.310	2.2	73.3	26.3	0.4	0.81
<i>Ge</i> , чист.	$5.9 \cdot 10^3$	0.222	0.67	3.1	98.5	1.4	0.2	0.042

Из этих данных следует, что τ_1 и I_1 уменьшаются, в то время как I_2 увеличивается с ростом плотности дислокаций в *Ge* *n* - и *p* - типа. Влияние деформации на временные спектры более сильно проявляется в образцах *n* - типа по сравнению с образцами *p* - типа. τ_3 намного больше τ_1 и τ_2 , а I_3 пренебрежимо мала. I_2 в недеформированных чистых образцах *Ge* достаточно велика. Из данных табл.3 следует, что I_3 в легированных образцах

Ge имеет пренебрежимо малую величину. Эти результаты говорят о захвате позитронов дислокациями. В табл.3 приведены скорости захвата позитронов, вычисленные в рамках ловушечной модели. Величины k являются суммой k в недеформированных образцах и k , связанных дислокациям.

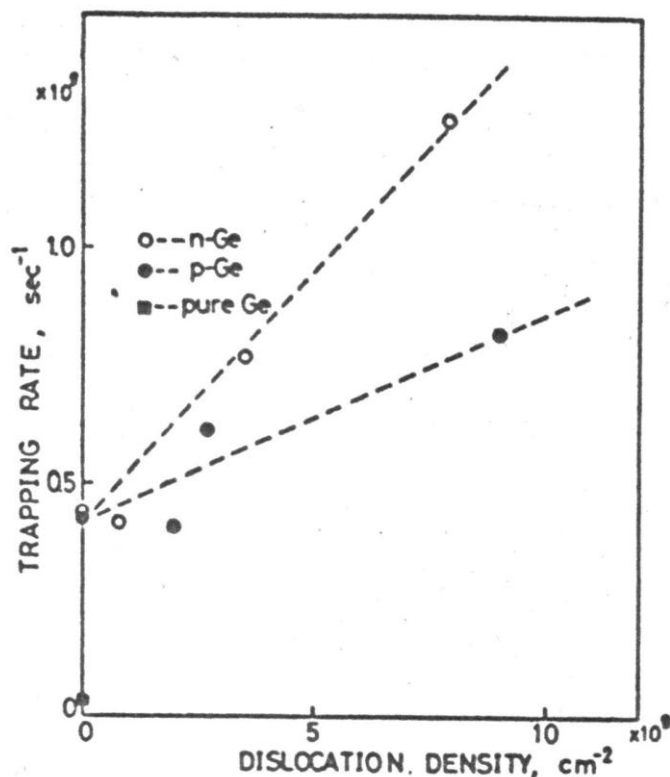


Рис. 9. Скорости захвата позитронов в образцах германия n- и p-типа, деформированных сжатием

На рис. 9 показана зависимость общей скорости захвата от плотности дислокаций. Скорости захвата позитронов в *Ge* n - типа больше, чем в образцах p - типа. По формуле $k = \rho v w$ находим w : в *Ge* n - типа $w = 20,0 \text{ \AA}$; в *Ge* p - типа $w = 8,2 \text{ \AA}$. В рамках этой же модели были вычислены w и в недеформированных чистых образцах: в *Ge* n - типа $w = 4,2 \text{ \AA}$; в *Ge* p - типа $w = 4,1 \text{ \AA}$. 60° дислокации в полупроводниках имеют разорванные неспаренные электроны, как и в *GaAs*, на концах наружных плоскостей. Радиус цилиндрической заряженной области определяется формулой (2), а потенциальная энергия позитрона – выражением (3). Схематически поведение потенциала показано на рис. 10 (вернее схема расположения зарядов).

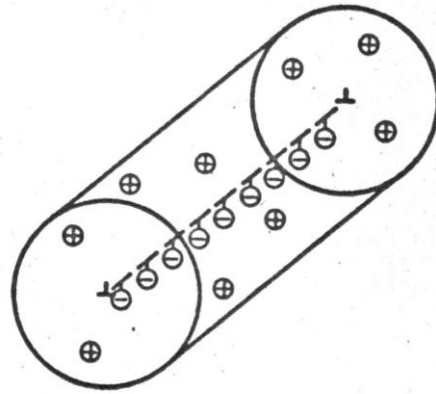


Рис. 10. Цилиндрическая область пространственного заряда вдоль направления 60° дислокации в полупроводнике n-типа (модель Рида [19])

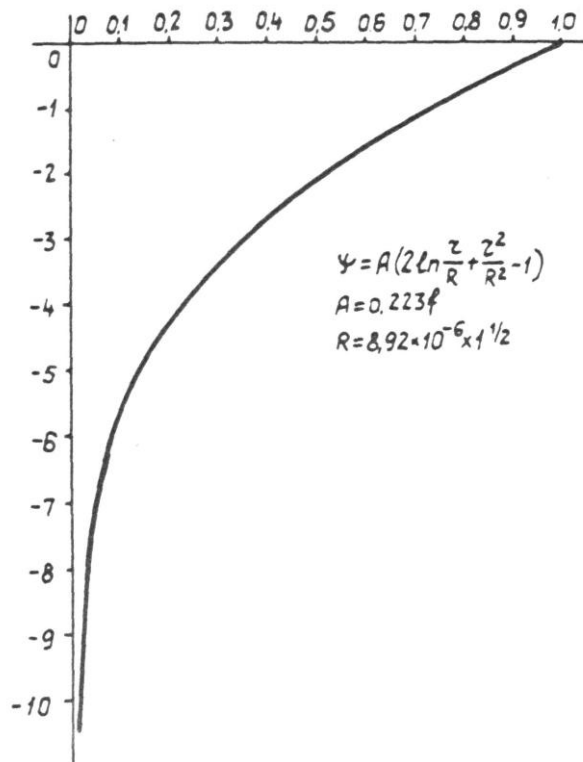


Рис. 11. Потенциальная энергия позитрона в области дислокаций в германии n-типа

На рис. 11 приведена зависимость потенциальной энергии в германии со значениями концентраций примеси $N_d - N_a = 1,0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$; $C = 4 \text{ \AA}$ и $\epsilon = 16,1$, но с неизвестным значением f . Глубина потенциальной ямы для позитрона $\psi(\alpha w/2) = -0,67 \text{ эВ}$ (где $\alpha = 0,2$, а $r = \alpha w/2$). Параметр f равен $f = 0,26$ для 60° дислокации в Ge p-типа. Эта величина в три раза больше f , получаемой при помощи измерения эффекта Холла.

В Ge p-типа известно, что плотность носителей возрастает при деформации в температурной области выше 100 К [32]. Это подтверждает предположение, что дислокации в Ge p-типа ведут себя как акцепторы при комнатной температуре в противоположность образцам Ge n-типа. В работе [33] был получен потенциал около заряженной дислокации в Ge p-типа как сумма экранированных кулоновских потенциалов, возникающих от всех наружных электронов, захваченных дислокацией

$$\psi(\bar{r}) = \left(\frac{e^2}{r} \right) \sum_i (1/|r-r_i|) \exp(-(r-r_i)/\lambda) - \lambda^2 (N_{ac} - P), \quad (4)$$

где $\lambda^2 = \epsilon kT / e^2 P$ - длина экранирования, P - плотность дырок, а N_{ac} - число ионизованных акцепторных уровней. На рис. 11 представлен потенциал вида (4). Кривая на этом рис. соответствует случаю $f = 0,25$ и $\lambda = 5,29 \text{ \AA}$. В этом случае выполняется равенство $\psi(\alpha w/2) = -0,67 \text{ эВ}$. Следовательно величина f в образцах *Ge n* - типа гораздо больше w в *Ge p* - типа из-за эффекта экранирования. Этот результат подтверждает вывод о том, что энергетические уровни наружных электронов на дислокации в германия р типа лежат в окрестности верха валентной зоны. Таким образом, как видим, метод ПАС с успехом может быть применен для определения природы и плотности дислокаций.

Заключение

Показано, что метод позитронной аннигиляционной спектроскопии может быть с успехом использован для определения природы и плотности дислокаций в полупроводниках, так как эффективными центрами захвата позитронов являются отрицательно заряженные и нейтральные дислокации.

Примечания:

1. Арефьев К.П., Воробьев С.А., Прокопьев Е.П. Позитроника в радиационном материаловедении ионных структур и полупроводников. М.: Энергоатомиздат, 1983. 88 с.
2. Прокопьев Е.П., Тимошенко С.П., Графутин В.И., Мясищева Г.Г., Фунтиков Ю.В. Позитроника ионных кристаллов, полупроводников и металлов Москва: Ред.-изд. отдел МИЭТ, 1999. 176 с. (см. также <http://www.prokoper.narod.ru>).
3. Арифов П.У., Арутюнов Н.Ю., Прокопьев Е.П. и др. Квантовые свойства атомов и ионов и позитронная диагностика. Ташкент: ФАН, 1975. 242 с.
4. Арефьев К.П., Арифов П.У., Прокопьев Е.П. и др. Позитронсодержащие системы и позитронная диагностика. Ташкент: ФАН, 1978. 192 с.
5. Прокопьев Е.П. Введение в теорию позитронных процессов в полупроводниках и ионных кристаллах. М., 1979. 384 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2837. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". № 27. 1980. Сер. "ЭР".
6. Прокопьев Е.П. Исследования в области физики медленных позитронов. Позитронная аннигиляция – новый метод изучения строения вещества. М., 1986. 86 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-4367. Сб. реф. НИОКР, обзоров, переводов и деп. рукописей. Сер."ИМ". №12. 1987.
7. Прокопьев Е.П., Кузнецов Ю.Н., Хашимов Ф.Р. Основы позитроники полупроводников. М., 1976. 343 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2073. РИ.77.06.3412.
8. Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П., Варисов А.З. Основы теории позитронных состояний в ионных кристаллах. М., 1978. 292 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника", Р-2382. Сб. ВИМИ "Военная техника и экономика". Сер. общетехническая. №14. 1978.
9. Варисов А.З., Арефьев К.П., Воробьев А.А., Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П. Позитроны в конденсированных средах. М., 1977. 489 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2317. Сб. ВИМИ "Военная техника и экономика". Сер. общетехническая. №9. 1978.
10. Варисов А.З., Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П. Аннигиляция позитронов в полимерах. М., 1978. 126 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2501. Сб. ВИМИ "Военная техника и экономика". Сер. общетехническая. №24. 1978.
11. Богданович Б.Ю., Графутин В.И., Калугин В.В., Нестерович А.В., Прокопьев Е.П., Тимошенко С.П., Чаплыгин Ю.А.. Технологии и методы исследования структур кремний на изоляторе. М.: МИЭТ, 2003. 288 с.
12. Графутин В.И., Прокопьев Е.П. // Успехи физических наук. 2002. Т.172. №1. С.67-83.
13. Бартенев Г.М., Цыганов А.Д., Прокопьев Е.П., Варисов А.З. Аннигиляция позитронов в ионных кристаллах // Успехи физических наук. 1971. Т.103. Вып. 2. С.339.

14. Бартенев Г.М., Варисов А.З., Гольданский В.И., Прокопьев Е.П., Цыганов А.Д. Определение эффективных зарядов анионов в средах ионного типа позитронным методом // Успехи химии. 1972. Т.41. Вып.4. С.585.
15. Варисов А.З., Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П., Филиппьев А.И. Физика и химия превращений позитронов и позитрония в полимерах // Успехи химии. 1980. Т.50. Вып.4. С.1892-1922.
16. Дехтяр И.Я., Михаленков В.С., Сахаров С.Т. // ФТТ. 1969. Т.11. С.3322.
17. Lisitsa V., Pidlisnyi T., Tsebulia G. // Surf. Sci. 1968. Vol.11. P.411.
18. Gallagher C. // Phys. Rev. 1952, Vol.88. P.751
19. Read W., Pearsson G. Dislocations and mechanical properties of crystals. Ed. J.Wiley, N.Y., 1957. P.537.
20. Холмс П. Травление полупроводников. М.: Мир, 1965. С.178.
21. Сборник «Полупроводники». М.: ИЛ, 1962. С.455.
22. Дехтяр И.Я., Д.А.Левина, Михаленков В.С. // ДАН СССР. 1964. Т.156. С.795.
23. Kuramoto T., Takeuchi S., Noguchi M., Chiba T., Tsuda N. // J. Phys. Soc. Japan. 1973. Vol.34. P.103.
24. Kuramoto T., Takeuchi S., Noguchi M., Chiba T., Tsuda N. // Appl. Phys. 1974. Vol.4. P.41.
25. Mihara M., Ninomija N. // J. Phys. Soc. Japan. 1968. Vol.25. P.1198.
26. Brandt W., Waung H., Levy P. Phys. Rev. Letters. 1971. Vol.26. P.496.
27. Chiba T., Noguchi M., Mitsushashi, Tanaka T., Tsuda N. J. Phys. Soc. Yapan. 1971. Vol.31. P.1288.
28. Mitsushashi T., Noguchi M., Chiba T., Ono A., Ishihara M., Tsuda N. J. Phys. Soc. Yapan. 1972. Vol.32. P.1281.
29. Read W. Phil. Mag. 1954. Vol.45. P.775
30. Pearson G., Read W., Morin F. Phys. Rev. 1954. Vol.93. P.666.
31. Weeren J. van, Kopmans G., Blok J. Phys. St. sol. 1968. Vol.27/ P.219.
32. Schrötter W. Phys. St. sol. 1967. Vol.21. P.211.
33. Прокопьев Е.П. // Химическая физика. 1999. Т.18. №5. С.45.
34. Wheeler J.A. // Ann. N. Y. Acad. Sci. 1946. V. 48. №1. P.219.
35. Прокопьев Е.П. // Украинский физический журнал. 2000. Т.45. №7. С.881.
36. Dannefaer S. // Phys. status solidi (a). 1987. Vol.102. №2. P.481.

References:

1. Aref'ev K.P., Vorob'ev S.A., Prokop'ev E.P. Pozitronika v radiatsionnom materialovedenii ionnykh struktur i poluprovodnikov. M.: Ergoatomizdat, 1983. 88 s.
2. Prokop'ev E.P., Timoshenkov S.P., Grafutin V.I., Myasishcheva G.G., Funtikov Yu.V. Pozitronika ionnykh kristallov, poluprovodnikov i metallov Moskva.: Red.-izd. otdel MIET, 1999. 176 c. (sm. takzhe <http://www.prokopep.narod.ru>).
3. Arifov P.U., Arutyunov N.Yu., Prokop'ev E.P. i dr. Kvantovye svoistva atomov i ionov i pozitronnaya diagnostika. Tashkent: FAN, 1975. 242 s.
4. Aref'ev K.P., Arifov P.U., Prokop'ev E.P. i dr. Pozitronsoderzhashchie sistemy i pozitronnaya diagnostika. Tashkent: FAN, 1978. 192 s.
5. Prokop'ev E.P. Vvedenie v teoriyu pozitronnykh protsessov v poluprovodnikakh i ionnykh kristallakh. M., 1979. 384 s. - Dep. v TsNII "Elektronika". R-2837. MRS VIMI "Tekhnika, tekhnologiya, ekonomika". № 27. 1980. Ser. "ER".
6. Prokop'ev E.P. Issledovaniya v oblasti fiziki medlennykh pozitronov. Pozitronnaya annigilyatsiya – novyi metod izucheniya stroeniya veshchestva. M., 1986. 86 s. - Dep. v TsNII "Elektronika". R-4367. Sb. ref. NIOKR, obzorov, perevodov i dep. rukopisei. Ser."IM". №12. 1987.
7. Prokop'ev E.P., Kuznetsov Yu.N., Khashimov F.R. Osnovy pozitroniki poluprovodnikov. M., 1976. 343 s. - Dep. v TsNII "Elektronika". R-2073. RI.77.06.3412.
8. Kuznetsov Yu.N., Prokop'ev E.P., Varisov A.Z. Osnovy teorii pozitronnykh sostoyanii v ionnykh kristallakh. M., 1978. 292 s. - Dep. v TsNII "Elektronika", R-2382. Sb. VIMI "Voennaya tekhnika i ekonomika". Ser. obshchetekhnicheskaya. №14. 1978.

9. Varisov A.Z., Arefev K.P., Vorob'ev A.A., Kuznetsov Yu.N., Prokop'ev E.P. Pozitrony v kondensirovannykh sredakh. M., 1977. 489 s. - Dep. v TsNII "Elektronika". R-2317. Sb. VIMI "Voennaya tekhnika i ekonomika". Ser. obshchetekhnicheskaya. №9. 1978.
10. Varisov A.Z., Kuznetsov Yu.N., Prokop'ev E.P. Annigilyatsiya pozitronov v polimerakh. M., 1978. 126 s. - Dep. v TsNII "Elektronika". R-2501. Sb. VIMI "Voennaya tekhnika i ekonomika". Ser. obshchetekhnicheskaya. №24. 1978.
11. Bogdanovich B.Yu., Grafutin V.I., Kalugin V.V., Nesterovich A.V., Prokop'ev E.P., Timoshenkov S.P., Chaplygin Yu.A. Tekhnologii i metody issledovaniya struktur kremnii na izolyatore. M.: MIET, 2003. 288 s.
12. Grafutin V.I., Prokop'ev E.P. // Uspekhi fizicheskikh nauk. 2002. T.172. №1. S.67-83.
13. Bartenev G.M., Tsyganov A.D., Prokop'ev E.P., Varisov A.Z. Annigilyatsiya pozitronov v ionnykh kristallakh // Uspekhi fizicheskikh nauk. 1971. T.103. Vyp. 2. S.339.
14. Bartenev G.M., Varisov A.Z., Gol'danskii V.I., Prokop'ev E.P., Tsyganov A.D. Opredelenie effektivnykh zaryadov anionov v sredakh ionnogo tipa pozitronnym metodom // Uspekhi khimii. 1972. T.41. Vyp.4. S.585.
15. Varisov A.Z., Kuznetsov Yu.N., Prokop'ev E.P., Filip'ev A.I. Fizika i khimiya prevrashchenii pozitronov i pozitroniya v polimerakh // Uspekhi khimii. 1980. T.50. Vyp.4. S.1892-1922.
16. Dekhtyar I.Ya., Mikhailenkov V.S., Sakharov S.T. // FTT. 1969. T.11. S.3322.
17. Lisitsa V., Pidlisnyi T., Tsebulia G. // Surf. Sci. 1968. Vol.11. P.411.
18. Gallagher C. // Phys. Rev. 1952, Vol.88. P.751
19. Read W., Pearsson G. Dislocations and mechanical properties of crystals. Ed. J.Wiley, N.Y., 1957. P.537.
20. Kholms P. Travlenie poluprovodnikov. M.: Mir, 1965. S.178.
21. Sbornik «Poluprovodniki». M.: IL, 1962. S.455.
22. Dekhtyar I.Ya., D.A.Levina, Mikhailenkov V.S. // DAN SSSR. 1964. T.156. S.795.
23. Kuramoto T., Takeuchi S., Noguchi M., Chiba T., Tsuda N. // J. Phys. Soc. Japan. 1973. Vol.34. P.103.
24. Kuramoto T., Takeuchi S., Noguchi M., Chiba T., Tsuda N. // Appl. Phys. 1974. Vol.4. P.41.
25. Mihara M., Ninomija N. // J. Phys. Soc. Japan. 1968. Vol.25. P.1198.
26. Brandt W., Waung H., Levy P. Phys. Rev. Letters. 1971. Vol.26. P.496.
27. Chiba T., Noguchi M., Mitsushashi, Tanaka T., Tsuda N. J. Phys. Soc. Yapan. 1971. Vol.31. P.1288.
28. Mitsushashi T., Noguchi M., Chiba T., Ono A., Ishihara M., Tsuda N. J. Phys. Soc. Yapan. 1972. Vol.32. P.1281.
29. Read W. Phil. Mag. 1954. Vol.45. P.775
30. Pearson G., Read W., Morin F. Phys. Rev. 1954. Vol.93. P.666.
31. Weeren J. van, Kopmans G., Blok J. Phys. St. sol. 1968. Vol.27/ P.219.
32. Schrötter W. Phys. St. sol. 1967. Vol.21. P.211.
33. Prokop'ev E.P. // Khimicheskaya fizika. 1999. T.18. №5. S.45.
34. Wheeler J.A. // Ann. N. Y. Acad. Sci. 1946. V. 48. №1. P.219.
35. Prokop'ev E.P. // Ukrainskii fizicheskii zhurnal. 2000. T.45. №7. S.881.
36. Dannefaer S. // Phys. status solidi (a). 1987. Vol.102. №2. R.481.

УДК 539.124.6:621.315.592

Определение природы и плотности дислокаций в полупроводниках методом позитронной аннигиляционной спектроскопии. Обзор

^{1, 2} Евгений Петрович Прокопьев

¹ Сергей Сергеевич Евстафьев

¹ Сергей Петрович Тимошенко

¹ Борис Михайлович Симонов

² Виктор Иванович Графутин

¹ Алексей Сергеевич Тимошенко

¹ Игорь Михайлович Бритков

¹ Олег Михайлович Бритков

¹ Московский государственный институт электронной техники (технический университет), МИЭТ, Российская Федерация

124498, Москва, г. Зеленоград, проезд 4806, д. 5

² Федеральное Государственное Унитарное Предприятие «Государственный Научный центр Российской Федерации – Институт теоретической и Экспериментальной Физики им.

А.И.Алиханова», ФГУП ГНЦ РФ – ИТЭФ, Российская Федерация

117218, Москва, ул. Б. Черемушkinsкая, 25

Аннотация. Основными методами изучения позитронной аннигиляции являются:

а) определение спектров углового распределения аннигиляционных фотонов (УРАФ) $I(\theta)$; б) изучение спектров временного распределения аннигиляционных фотонов (ВРАФ), характеризующихся интенсивностями I_i и временами жизни τ_i ; в) измерение доплеровского уширения аннигиляционной линии (ДУАЛ), характеризующееся линейным параметром S - отношением центральной части аннигиляционного фотопика к площади всего распределения аннигиляционного фотопика. Метод ВРАФ дает сведения об электронной плотности в месте аннигиляции позитрона, а методы УРАФ и ДУАЛ дают информацию о распределении импульсов электронов и о химическом составе среды, окружающей нанобъекты, в месте аннигиляции. В данном обзоре показано, что эти методы позволяют определять природу и плотности дислокаций в полупроводниках, так как эффективными центрами захвата позитронов являются отрицательно заряженные и нейтральные дислокации

Ключевые слова: полупроводники; методом позитронной аннигиляционной спектроскопии.