

P. Baranskii, G. Gaidar, P. Litovchenko

STRUCTURE PERFECTION OF DISLOCATIONLESS UNDOPED BULK Si SINGLE CRYSTALS USED AS SUBSTRATES FOR EPITAXIAL GROWTH OF SEMICONDUCTOR NANOSTRUCTURES

This report is devoted to the analysis of real conditions which exist at the boundary of a substrate and epitaxial grown films. The analysis is made taking into account the fact that substrates prepared from the best quality material, namely FZSi single crystals, have various microdefects of different nature inside their volume. Technological problems arising at the epitaxial growth of homo- or heterolayers on a substrate are caused by the existence of microdefects inside the bulk of the substrate with their dimensions lying in the range from few units to several hundreds of nm and their projections emerging from the bulk onto the surface which is actual for the epitaxy and which departs the substrate and epitaxial grown layer.

УДК 621.315.592

Шаховцова С. І., Шпінар Л. І., Ясковець І. І.

РУХЛИВІСТЬ НОСІЇВ СТРУМУ В ГЕРМАНІЇ, ЛЕГОВАНУМУ ОЛОВОМ

Досліджувалась температурна залежність холівської рухливості електронів у германії, легованому оловом, в концентрації 1019-1020 см⁻³. Головною причиною зменшення рухливості є розсіювання носіїв на флуктуаціях розподілу олова. В рамках дифузійного наближення пояснені особливості температурної залежності рухливості, наведено оцінку масштабу флуктуацій у розподілі олова по об'єму зразка.

Вступ

Легування германію ізовалентними домішками (ІВД) IV групи Si, Sn, Pb є найпростішим варіантом ізоелектронної домішкової ситуації у кристалі. Таке легування є одноатомним і не змінює координаційного числа вузлів заміщення. Згідно з існуючою класифікацією домішки IV групи відносно Ge є ІВД другого роду. Це означає, що, незважаючи на те що ІВД-заміщення не вносять ні донорних, ні акцепторних рівнів у заборонену зону, вони, за відносно невеликих концентрацій, здатні утворювати квазілокальні рівні в дозволених зонах. Це т. зв. резонансні рівні, які проявляють, з одного боку, індивідуальні властивості атомів, а з другого – належать неперервному зонному спектру [1].

Отримання гомогенних монокристалів системи Ge-Sn методом Чохральського становить велику технологічну проблему. У відповідності з особливостями фазової діаграми вміст Sn у твердому германії не перевищує $5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$

[2, 3]. Велика сегрегація при кристалізації затруднює як отримання крупних монокристалів, так і рівномірний розподіл олова по об'єму, оскільки рівноважний коефіцієнт розподілу Sn в германії у точці плавлення Ge $k = 0,019$. Різниця в ковалентних радіусах атомів Sn і Ge зумовлює появу деформаційної напруги в кристалах германію. З цих причин у системі слід очікувати утворення областей неоднорідностей (ОН), які включають не тільки атоми Sn, а й інші дефекти. В літературі відомі експериментальні результати, які свідчать про неоднорідний розподіл атомів Sn у германії [3].

У цій праці подаються експериментальні результати дослідження рухливості електронів у Ge, легованому оловом. В рамках дифузійного наближення пояснені особливості температурної залежності рухливості, наведено оцінку масштабу флуктуацій у розподілі Sn по об'єму зразка.

Експеримент

Монокристали германію, легованого Sn в концентрації $1,5 \cdot 10^{19}$ – $1,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, вирощува-

лися за методом Чохральського в атмосфері чистого гелію в напрямку $\langle 111 \rangle$. Легування кристалів Ge провадилося домішкою Sb в концентрації $(2,5-4,6) \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ у процесі вирощування, ступінь компенсації $k \approx 0,6$. Зразки вирізалися із злитка з максимальним вмістом олова за відсутності видимих виділень олова [4, 5]. Концентрація Sn у зразках визначалася методами нейтронно-активаційного кількісного спектрального аналізу, а також за допомогою рентгенівського мікроаналізатора (лінія Sn – L_{α} 3,6Å). Досліджувалась температурна залежність рухливості електронів у інтервалі 80–300 К.

Результати та обговорення

На рис. 1 наведені експериментальні температурні залежності рухливості електронів $\mu(T)$. Із збільшенням вмісту олова рухливість зменшується, а її температурна залежність в області розсіювання на фонах стає слабкішою, ніж $T^{-1,6}$.

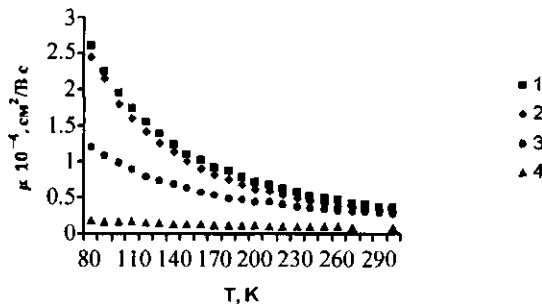


Рис. 1. Температурна залежність рухливості носіїв струму у зразках Ge, легованих оловом у концентрації: 1 – 0; 2 – $1,5 \cdot 10^{19}$; 3 – $1 \cdot 10^{20}$; 4 – $1,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$

У реальній ситуації за наявності ОН різного походження у зразках германію (наприклад, області неупорядкованості атомів кремнію у сплавах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ [6,7], області неупорядкованості в Ge і Si при опроміненні високоенергетичними частинками [8] та ін.) аналіз $\mu(T)$ слід проводити в дифузійному наближенні [9], оскільки звичайно виконується співвідношення $L \gg \lambda$. Тут L і λ – характерний просторовий розмір електричних полів, зумовлених наявністю ОН, і довжина вільного пробігу носіїв струму зумовлена розсіюванням на теплових коливаннях ґратки.

Справді, при неоднорідному розподілі концентрації олова виникають скупчення атомів олова, які в першому наближенні можна вважати просто включеннями в напівпровідниковій матриці із відповідними роботами виходу з матриці 4,76 еВ та включення 4,38 еВ. За таких значень робіт виходу найближче оточення включень олова буде від'ємно зарядженим завдяки переходу електронів із олова в германій. Самі ж

включення можна розглядати як металеві включення в напівпровіднику, що несуть позитивний заряд. Величина потенціалу у внутрішній частині ОН не має значення, оскільки на рух носіїв основний вплив має далека область потенціалу. Вплив подібного розподілу густини заряду поблизу включення на електронний перенос у кремнії нами досліджений раніше (для легування гадолінієм) [10]. Такий підхід зумовлений тим, що поля неоднорідностей змінюються мало на відстанях порядку довжини вільного пробігу електронів і тому можуть бути включені у рівняння переносу поряд із зовнішнім прикладеним полем [11]. Завдання зводиться до знаходження електростатичного потенціалу, зумовленого включеннями (N – концентрація ОН у зразку):

$$\varphi(r) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(r-r_i). \quad (1)$$

В (1) φ_i – потенціал, зумовлений окремою i -ю областю, положення якої визначає радіус-вектор r_i . Потенціал φ визначається рівнянням Пуасона:

$$\nabla^2 \varphi = \frac{4\pi}{\epsilon} \rho(r), \quad (2)$$

де ρ – густина об'ємного заряду, яка залежить від вибору конкретної моделі неоднорідності, а ϵ – діелектрична проникливість. Отже, у зовнішній області ($r > r_0$, r_0 – геометричний розмір неоднорідності) маємо $\rho(r) = e(N_D - n(r))$, де N_D – концентрація донорної домішки, а $n(r)$ – концентрація електронів у зоні провідності. Всередині області пошкодження ($0 < r < r_0$) у грубому наближенні вважаємо потенціал постійним і рівним різниці рівнів Фермі в матриці та області пошкодження.

Рівняння Пуасона розв'язується за граничних умов: $\varphi(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$, $\varphi(r_0) = A$, де A – різниця робіт виходу. Розбиваючи зовнішню область (r_0, ∞) на дві – (r_0, r_2) та (r_2, ∞), де, відповідно, $e\varphi > kT$ і $kT > e\varphi$, отримаємо

$$r_2 = l_D \left[\left(1 + \frac{3r_0 A}{l_D k T} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right]. \quad (3)$$

Тут r_2 – віддаль від центра ОН, на якій потенціальна енергія носіїв стає рівною їх тепловій енергії, l_D – дебаївський радіус екранування. Згідно з (3) величина r_2 залежить від геометричного розміру області r_0 та різниці робіт виходу A .

Вважаючи, що частина об'єму, зайнята областями пошкоджень, разом із супутнім об'ємним зарядом менша за одиницю, відносна зміна рухливості може бути подана, як у [8], у вигляді:

$$\Delta\mu = \frac{4\pi}{9} N \left[r_2^3 + \frac{3}{2} r_2^2 l_D \right]. \quad (4)$$

Температурна залежність відносної зміни рухливості носіїв струму визначається співвідношен-

ням між r_0 і l_D . При $r \gg l_D$ потенціал змінюється досить різко і на рух носіїв основний вплив має жорстка серцевина потенціалу, де $e\phi(r) > kT$, незалежна від температури. При виконанні умови $r_0 \ll l_D$ на рух носіїв впливає далека область потенціалу, яка описується у дебаївському наближенні: $e\phi(r) > kT$. У цьому випадку просторові розміри потенціалу залежать від температури внаслідок температурної залежності радіуса Дебая, що й приводить до зміни $\mu(T)$ відносно відповідного однорідного кристала.

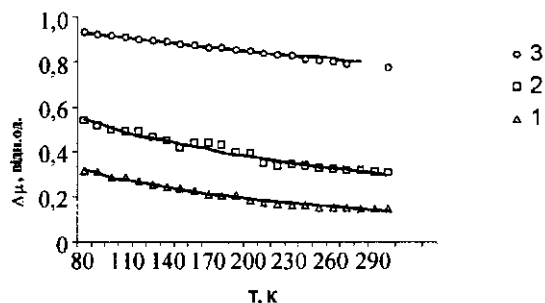


Рис. 2. Відносна зміна рухливості носіїв струму у зразках германію з різним вмістом олова. Точки – експеримент, 1 – $1,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, 2 – $1,0 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, 3 – $1,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Лінії – значення $\Delta\mu$, обчислені за формулою (4)

Відносну зміну рухливості можна знайти із експериментальних значень μ_0 (рухливість електронів в однорідному Ge) і μ^* (рухливість в Ge з оловом) за формулою $\Delta\mu = (\mu_0 - \mu^*)/\mu_0$. Розрахункова $\Delta\mu$ обчислювалась за формулою (4). Підгоночні параметри r_0 і N визначалися в області 300 °K. Перевірка моделі проводилася за залежністю $\mu(T)$ в області температур $80 < T < 300$ °K. Як видно з рис. 2, в рамках використаного підходу вдається задовільним чином описати температурну залежність рухливості в германії, легованому оловом.

Підгоночні параметри N і r_0 , що фігурують у виразі для відносної зміни рухливості $\Delta\mu$, є характеристикою флуктуації складу досліджуваних зразків. Вони визначаються термодинамічними умовами процесу вирощування зразків за наявності заданої концентрації олова. На рис. 3 подані значення r_0 як функція загальної концентрації олова, введеного в зразки германію.

Таким чином, геометричні розміри включень олова в германії є спадною функцією концентрації олова і змінюються від $4 \cdot 10^{-5} \text{ см}$ до $1,5 \cdot 10^{-5} \text{ см}$ в області досліджуваних концентрацій олова. Відповідно, концентрація включень Sn змінюється в межах $1,5 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$ – $2,3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$.

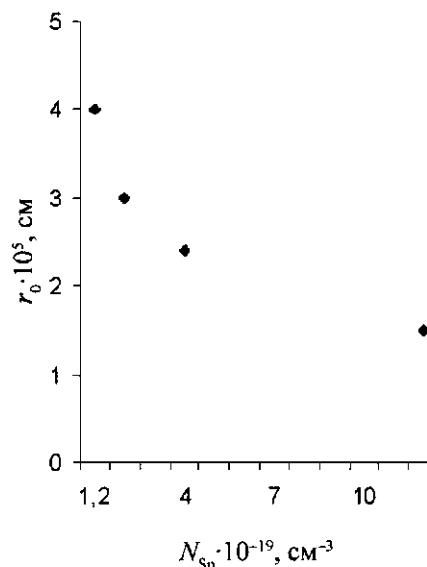


Рис. 3. Залежність просторових розмірів скупчень атомів олова від концентрації олова, введеного в германії

На нашу думку, поведінка знайдених параметрів флуктуації складу системи Ge–Sn свідчить про суттєвий вклад ентропійного члена в мінімум вільної енергії, що й приводить у разі збільшення концентрації Sn не до зростання просторових розмірів включень домішкових атомів, а до зростання числа ОН.

У рамках використаної моделі отримані значення N та r_0 мають оціночний характер з огляду уявлень про області неоднорідностей як кластери атомів олова, яким було приписане відповідне значення роботи виходу. Насправді до складу таких областей входять і дефекти іншого виду. Крім того, наведений аналіз базувався на суттєво спрощуючому припущенні про однорідний характер розподілу таких включень по об'єму зразка. Однак наведені прості модельні уявлення про структуру системи Ge–Sn досить задовільно описують температурну залежність носіїв струму.

1. Баженов В. К., Фистуль В. И. Изозлектронные примеси в полупроводниках. Состояние проблемы // ФТП.– Т. 18.– 1984. – С. 1345–1362.
2. Глазов В. М., Земсков В. С. // Физико-химические основы легирования полупроводников.– М.: Наука, 1967.
3. Shimizu H. Optical and electrical properties of Ge heavily doped with Sn // Science of light.– V. 21.– 1972.– P. 53–88.
4. Скудова Е. В., Дегтяров В. Ф., Безручко В. И. Влияние электронного облучения на Ge, легированный Sn и Sb. // Физика и химия обработки материалов.– Т. 2.– 1987.– С. 140–142.
5. Белокурова И. Н., Дегтяров В. Ф., Гарник В. С., Скудова

Е. В., Хивжус Д. М. Энергетический спектр и термическая стабильность радиационных дефектов // Физика и химия обработки материалов.– Т. 2.– 1988.– С. 37–40.

6. Шаховцов В. И., Шаховцова С. И., Шварц М. М., Шпінар Л. И., Ясковец И. И. Подвижность носителей тока в твердых растворах Ge(Si) // ФТП.– Т. 23.– 1989.– С. 48–51.
7. Шаховцова С. И., Шаховцов К. В., Шпінар Л. И., Ясковец И. И. Масштаб флуктуаций состава в сплавах Ge_{1-x}Si_x // ФТП.– Т. 27.– 1993.– С. 1035–1039.
8. Шаховцов В. И., Шаховцова С. И., Шпінар Л. И., Ясковец И. И. Подвижность носителей тока в полупровод-

- никах с областями разупорядочения // ФТП.– Т. 11.– 1977.– С. 1967–1971.
9. Шпинар Л. И., Ясковец И. И. К теории проводимости и эффекта Холла в неоднородных полупроводниках // ФТТ.– Т. 26.– 1984.– С. 1725–1730.
10. Антоненко Р. С., Шаховцов В. И., Шиндик В. Л., Шпинар Л. И., Ясковец И. И. Электрофизические свойства облученного p – Si с примесью гадолиния // ФТП.– Т. 12.– 1978.– С. 1707–1713.
11. Пекар С. И. Теория подвижности, эффекта Холла и магнетосопротивления в электронном полупроводнике с заряженными дефектами // ФТТ.– Т. 8.– 1966.– С. 1115–1121.

S. Shakhovtsova, L. Shpinar, I. Yaskovets

THE MOBILITY OF CARRIERS IN GERMANIUM SINGLE CRYSTALS HEAVILY DOPED WITH TIN

The Hall mobility of electrons in heavily doped germanium has been obtained as a function of temperature and tin concentration. In the tin concentration range between 10^{19} – 10^{20} cm³ tin precipitates are of first importance for scattering processes. The peculiarities of the temperature dependence of mobility were clarified in the diffusion approximation. An analyses of the temperature dependence of mobility can be used to estimate the scale of fluctuations in the distribution of tin in the interior of a crystal.