

Features of FeB pair dissociation and repairing in silicon n+–p-p+ structures under ultrasound loading condition

Oleg Olikh^{1*}, Vitaliy Kostylyov², Victor Vlasiuk², Roman Korkishko², Roman Chupryna¹

¹*Physics Faculty, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine*

²*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine*

**E-mail address: olegolikh@knu.ua*

Abstract

The influence of ultrasound on iron-boron pair dissociation as well association in silicon n+–p-p+ structures has been investigated experimentally. The FeB pair transformation were monitored by measurements of kinetics of short circuit current. It has been found that the ultrasound leads to the decrease in both concentration of pairs, which were dissociated by light, and time of association. Представлено результати дослідження особливостей ефекту залежно від інтенсивності освітлення, температури, частоти та потужності ультразвукового навантаження. Проведено аналіз можливих механізмів виявлених ефектів ультразвукового впливу.

INTRODUCTION

Загальновідомо, що властивості напівпровідникових кристалів та структур багато в чому визначаються їхнім дефектним складом. Як наслідок, методи, спрямовані на модифікацію системи дефектів є надзвичайно важливими з точки зору прикладного застосування. Більшість таких методів ґрунтуються на використанні опромінення, термообробки чи спеціальних режимів вирощування кристалів. Проте багаточисленні експериментальні дослідження показали, що достатньо ефективним інструментом контрольованого впливу на дефекти є ультразвук. Наприклад, виявлено, що поширення акустичних хвиль викликає просторовий перерозподіл домішок, перебудову точкових метастабільних дефектів, зміну зарядового стану рекомбінаційних центрів, низькотемпературний відпал радіаційних дефектів. Подібні ефекти спостерігаються, зокрема, і в кремнії, який є

основним матеріалом сучасних мікроелектроніки та сонячної енергетики.

Використання активного ультразвуку має свої переваги, пов'язані з локалізацією дії пружних коливань та можливості налаштування цього зовнішнього чинника шляхом зміни типу, поляризації чи частоти акустичних хвиль. Проте широкого практичного застосування подібний спосіб модифікації дефектної підсистеми не знайшов, не в останню чергу через відсутність достатньої кількості відповідних експериментальних досліджень. Особливо перспективним, на нашу думку, є використання УЗ навантаження як додаткового фактору впливу під час різноманітних технологічних операцій, які, зокрема, викликають і трансформації в системі дефектів. На користь цього припущення свідчать результати, отримані при проведенні іонної імплантації в УЗ полі.

Iron is an important contaminant in silicon-based integrated circuit and solar cell technology. Нерідко, iron-related дефекти є основними рекомбінаційними центрами, які визначають час життя неосновних носіїв заряду зокрема та device characteristics загалом. Як наслідок, практично важливими є методи, що мають на меті гетерування заліза на різноманітних стоках. Загалом, інформації про ці дефекти достатньо багато. Так відомо, що at room temperature in thermal equilibrium virtually all Fei is present as FeB pairs in Si:B. FeB pair dissociation can be accomplished by illumination at room temperature, by minority carrier injection, or by increasing temperature. Крім того, показано, що ultrasound vibrations with a frequency 25-70 kHz and an acoustic lattice deformation amplitude of 10^{-5} – 10^{-4} також здатні викликати руйнування пар FeB. Проте на практиці найширше використовується саме light-induced dissociation. Особливості такої dissociation and subsequent repairing є достатньо добре вивченими. However, to the best of our knowledge, інформація щодо впливу УЗ на ці процеси в літературі відсутня.

Метою даною роботи є експериментальне вивчення впливу ультразвукового навантаження з частотою 2-30 MHz and an lattice deformation $<10^{-6}$ на процеси перетворення $\text{FeB} \leftrightarrow \text{Fei} + \text{Bs}$ в кремнієвих сонячних елементах. Використання УЗ допорогової інтенсивності має на меті перешкодити незворотнім змінам властивостей матеріалу, а отримані результати можуть бути використані для тонкого акустокерованого налаштування процесів, пов'язаних з гетеруванням атомів заліза.

EXPERIMENTAL AND CALCULATION DETAILS

The n^+-p-p^+ -Si samples, shown in Fig.1, were used in experiment. Structure was fabricated from a 380 μm thick p-type boron doped Czochralski silicon wafer with [100] orientation and a resistivity of 10 $\Omega\cdot\text{cm}$. The n^+ emitter with a surface resistance of about 20-30 Ω/\square and a thickness of 0,7 μm was formed by phosphorus diffusion at 940°C. The anti-recombination isotype barrier was created by using p^+ layer (10-20 Ω/\square , 0,6 μm), which was formed by boron diffusion at 985°C. The antireflective and passivating SiO_2 (40 nm) and Si_3N_4 (30 nm) layers were formed on the front surface as well. The solid and grid Al contacts were formed on the rear and front surfaces respectively. The samples used in the experiment had the area of 1.52 x 1.535 cm^2 .

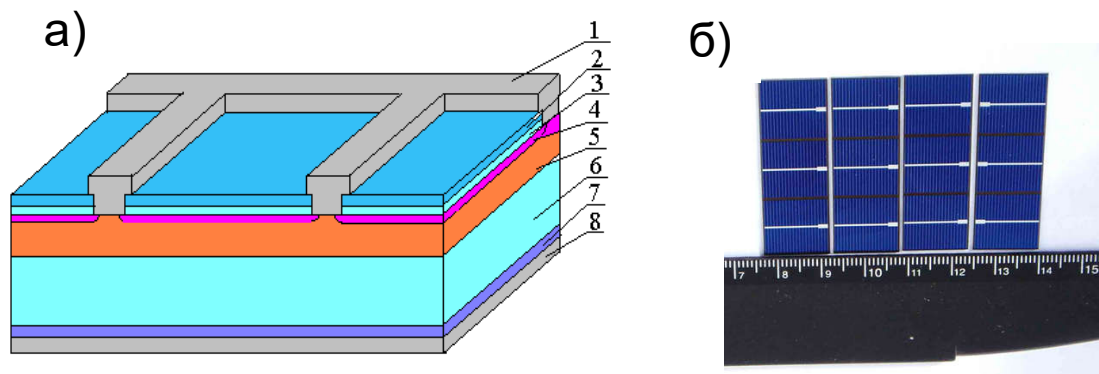


Fig. 1a. Scheme of the sample. 1 – frontal Al electrode; 2 – Si_3N_4 ; 3 – SiO_2 ; 4 – induced n^{++} -layer; 5 – diffusion n^+ -layer; 6 – p-base region; 7 – diffusion p^+ -layer; 8 – rear Al electrode. б - Вигляд реальних сонячних елементів; фотографія зроблена з боку фронтального металевого електроду

To dissociate the FeB pairs the frontal side of the sample was illuminated by halogen lamp with an radiation intensity W_{ill} of 0.08÷0.20 W/cm^2 . The illumination time t_{ill} is up to 30 s.

The FeB pair association were monitored by measurements of kinetics of short circuit current $I_{\text{sc}}(t)$ after halogen lamp illumination – see Fig.2. I_{sc} was measured under SC illumination by a low intensity monochromatic light source (light emitting diode SN-HPIR940nm-1W with light wavelength $\lambda=940$ nm). LED illumination was weak (the excess density of carriers $\Delta n < 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, the duty cycle while $I_{\text{sc}}(t)$ measuring was 0.5%) and did not

result in FeB dissociation. After halogen lamp illumination stop. FeB pairs form again and the I_{SC} starting value is fully recovered.

In fact, in conditions of homogeneous carrier generation in the base, which is several minority carrier diffusion lengths L_n , the short circuit current can be described as follows:

$$I_{SC}(t) = \frac{P_{ph}(1 - R_{ph})q\beta\lambda}{hc} \frac{\alpha_{ph} \sqrt{\frac{\mu_n kT}{q}} \tau(t)}{1 + \alpha_{ph} \sqrt{\frac{\mu_n kT}{q}} \tau(t)}, \quad (1)$$

where $\alpha_{ph} = \alpha_{ph}(T, \lambda)$ is the coefficient of light absorption, P_{ph} is the light power, R_{ph} is the coefficient of reflection, β is the coefficient of quantum yield, μ_n is the electron mobility, τ is the minority carrier lifetime. In the assumption that it is the iron related defects that play an essential role in the recombination, the following expression can be used to estimate τ :

$$\frac{1}{\tau(t)} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_{Fei}(t)} + \frac{1}{\tau_{FeB}(t)} + \frac{1}{\tau_{other}}, \quad (2)$$

were

τ_i is the lifetime associated with intrinsic recombination, τ_{Fei} and τ_{FeB} are related to the recombinations at interstitial iron atoms Fe_i and at FeB pairs, accordingly; τ_{other} describes further recombination channels (other impurities, lattice defects, surface recombination). In order to calculate τ_{Fei} and τ_{FeB} , Shokley-Read-Hall model was used

$$\tau_{SRH}(t) = \frac{\tau_{p0}(t) \cdot (n_0 + n_1 + \Delta n) + \tau_{n0}(t) \cdot (N_A + p_1 + \Delta n)}{N_A + n_0 + \Delta n}, \quad (3)$$

where N_A is the material's doping level (1.41016 cm^{-3}), n_0 is the equilibrium electron concentration given by the law of mass action; n_1 and p_1 , are given by

$$n_1 = N_C \cdot \exp(-(E_C - E_t)/kT), \quad p_1 = N_V \cdot \exp(-(E_t - E_V)/kT)$$

where E_C and E_V are the energies of the conduction band and valence band edge respectively, N_C and N_V are the densities of states in the conduction band and valence band, respectively and E_t is the energy level of the defect. The respective capture time constants of electrons and holes at the defect are given by

$$\tau_{p0} = (N_t \sigma_p v_{th})^{-1}, \quad \tau_{n0} = (N_t \sigma_n v_{th})^{-1}$$

where $N_{Fei}(t)$ and $N_{FeB}(t)$ concentration of the Fe_i and FeB, respectively, v_{th}

is the thermal velocity) and σ_n and σ_p are the respective capture cross-sections of electrons and holes at the defect.

The time dependence of interstitial iron atom concentration after pair dissociations is described by the known expression from [1]:

$$N_{Fe}(t) = (N_{Fe,0} - N_{Fe,eq}) \exp(-t/\tau_{ass}) + N_{Fe,eq}, \quad (4)$$

where τ_{ass} is the characteristic time of the complex association, according to the [1]

$$\tau_{ass} = \frac{5,7 \cdot 10^5}{N_A} T \exp\left(\frac{E_m}{kT}\right), \quad (5)$$

where E_m is the energy of Fe_i^+ migration; $N_{Fe,0}$ **концентрація міжвузольних атомів заліза, утворених в результаті освітлення**, $N_{Fe,eq}$ is the part of the interstitial iron atom with $N_{Fe,0}$ that remain unpaired in equilibrium state (*має бути: та частина міжвузольних атомів заліза з $N_{Fe,0}$, яка залишається неспареною в рівноважному стані*). According to [1], $N_{Fe,eq}$ depends on temperature, doping level and $N_{Fe,0}$: $N_{Fe,eq} = N_{Fe,eq}(T, N_A, N_{Fe,0})$. Як показують проведені оцінки, **для досліджуваних зразків при 340K $N_{Fe,eq} \approx 0,01 N_{Fe,0}$** .

In its turn, the iron-boron pair concentration N_{FeB} , which formed as a result of partial association of $N_{Fe,0}$ can be estimated from

$$N_{FeB}(t) + N_{Fe}(t) = N_{Fe,0}. \quad (6)$$

У випадку, коли інтенсивне освітлення викликає дисоціацію всіх пар, $N_{Fe,0}$ має збігатися з повною концентрацією домішкового заліза в структурі $N_{Fe,tot}$. Якщо тривалість (або інтенсивність) освітлення недостатня для повної дисоціації, то $N_{Fe,0} < N_{Fe,tot}$. В останньому випадку T_{other} також міститиме внесок в рекомбінацію тих пар FeB, які не дисоціювали (з концентрацією $N_{Fe,tot} - N_{Fe,0} - N_{Fe,eq}(T, N_A, N_{Fe,tot} - N_{Fe,0})$) та відповідної кількості Fe_i ($N_{Fe,eq}(T, N_A, N_{Fe,tot} - N_{Fe,0})$).

In calculation, we taken $\beta=1$, $R_{ph}=0,14$ (результат розрахунку відповідно до [1]), $\mu_n(T, N_A)$ from [2], v_{th}^n , v_{th}^p from [3], N_C , N_V from [4], the defects parameters from [5], $N_{Fe,eq}(T, N_A, N_{Fe,0})$ from [1], $\alpha_{ph} = \alpha_{ph}(T, \lambda)$ from [1,2]. При розрахунку t_i бралися до уваги band-to-band radiation recombination and Auger recombination, причому температурні залежності відповідних коефіцієнтів розраховувалися відповідно до [6]. We use Eqs. (1)-(6) to fit the experimental data $I_{SC}(t)$. P_{ph} , T_{other} , $N_{Fe,0}$ and E_m are taken as the fittings parameters. The fittings were performed by using the metaheuristic method EBLSHADE [7].

The example of fitting results is shown in Fig.2. In this case, the parameters, which were determined by fitting had the following values. $P_{ph} = (3,6 \pm 0,2) \cdot 10^{-4}$ W which agrees well with the measured by value PowerMeter Rk-5720 (3.510^{-4} W). $T_{rest} > 100$ s, which testifies that the contribution of other recombination pathways can be neglected.

$N_{\text{Fe},0} = (1,6 \pm 0,1) \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, which is close to the value obtained for the samples of the same series from Ln measuring before and after illumination ($0,5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$). At last, $E_m = (0,655 \pm 0,001) \text{ eV}$. This value coincides with the well known from [23,] value of $0,66 \sim \text{eV}$. Збіг визначених шляхом апроксимації величин та отриманих з інших джерел (насамперед це стосується E_m) proves that the investigations of $I_{\text{sc}}(t)$ after intensive illumination can be applied in finding parameters of iron-related defects. Крім того, особливості дисоціації пари (див. розділ 3.1), визначені таким чином також збігаються з відомими з літератури. Це також підтверджує доречність подібного підходу. Фактично, час відновлення ISC є індикатором величини енергії міграції, а амплітуда зміни ISC внаслідок інтенсивного опромінення пов'язана з концентрацією атомів заліза, які при цьому звільнилися. Зауважимо також, що такий підхід близький до методу, запропонованого в [], який передбачає оцінку поточної концентрації пар FeB під час асоціації за кінетикою фотолюмінісцентного сигналу.

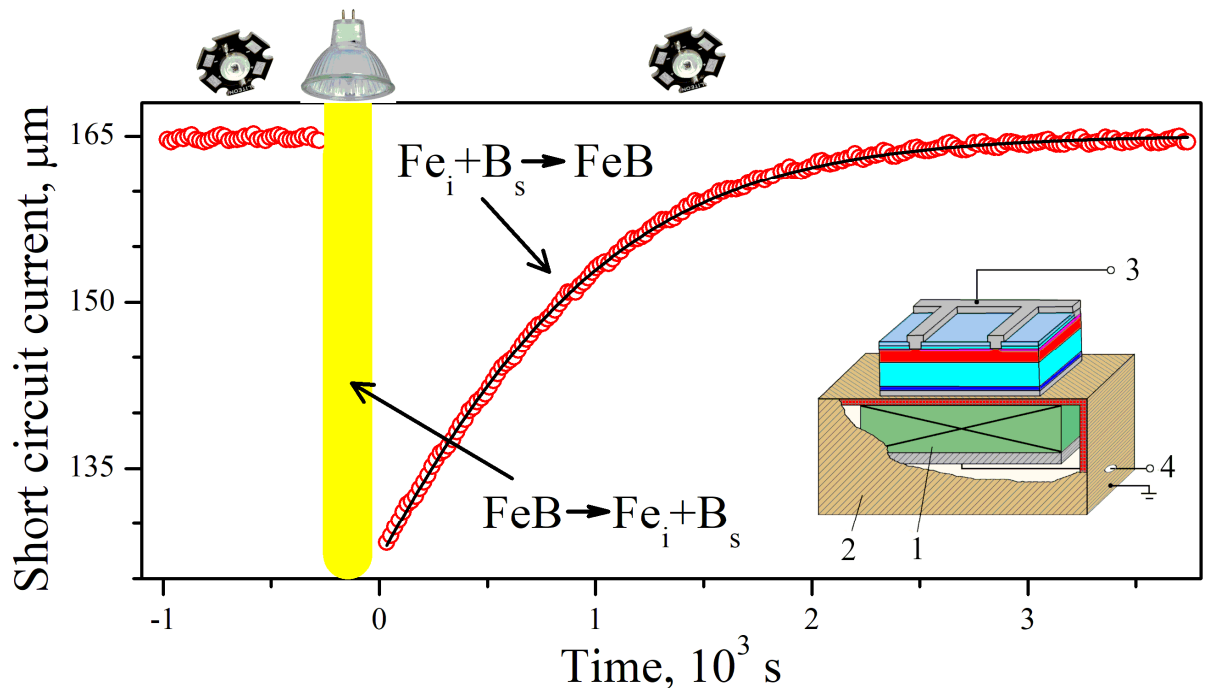


Рис.2. Kinetics of short circuit current after intensive illumination. The marks are the experimental results, the line is the fitted curve using Eqs. (1)-(9). Початок відліку часу відповідає моменту закінчення інтенсивного освітлення. $T = 340 \text{ K}$. Inset: Scheme of USL. 1 – piezoelectric transducer; 2 – metal foil (Cu), 3 and 4 – contact to I–V measure and to ultrasound excite, respectively.

The measurements were carried out over a temperature range of 300–340K. Temperature was varied by a thermoelectric cooler, controlled by STS-21 sensor and stabilized by computer-controlled PID loop.

In case of USL, the transverse (with frequency f_{US} 0.3 MHz) or longitudinal (2-31MHz) AWs were applied to the samples by using piezoelectric transducer. The US intensities W_{US} and amplitudes of lattice deformation

$\xi_{US} = \sqrt{2W_{US}/\rho_{Si} v_{US}^3}$, ($\rho_{Si}=2.33$ g/m³ is the silicon density, v_{US} is the US velocity, 9850m/s and 5840m/s in cases of longitudinal and transverse AWs, respectively) does not override 1.3 W/cm² and 510⁻⁶ respectively. Робота була спрямована на вивчення впливу саме пружних коливань на перебудову пар FeB і тому in order to avoid the effect of piezoelectric field, the transducer was shielded – see inset in Fig.2.

RESULTS AND DISCUSSION

FeB dissociation

The equilibrium between free Fe_i and Fe_iBS is determined by the following rate equations



where $K_a = T_{ass}^{-1}$ and K_d are the association and dissociation rates of the FeB pairs, respectively. Out of Eq. (7), taking into account that $N_{Fe} = N_{Fe,tot} - N_{FeB}$ and $N_{Fe}(t_{ill}=0) = N_{Fe,eq}$, the time dependent interstitial iron content can be described by

$$N_{Fe}(t_{ill}) = \left(N_{Fe,eq} - N_{Fe,tot} \frac{K_d}{K_a + K_d} \right) \exp(-(K_d + K_a)t_{ill}) + N_{Fe,tot} \frac{K_d}{K_a + K_d}. \quad (8)$$

При дослідженні процесів світлоіндукованої дисоціації пар FeB ми проводили освітлення структури за допомогою галогенової лампи, варіюючи час освітлення t_{ill} , після чого вимірювали кінетику відновлення струму короткого замикання – див. рис.3(а). Як видно з рисунку, тривалість відновлення струму короткого замикання не змінюється, тоді як амплітуда світлоіндукованих змін суттєво залежить від часу освітлення. Наступна (мається на увазі, та що була проведена після вимірювань) апроксимація експериментальних кривих відповідно до описаного у попередньому розділі підходу, дозволяла визначити кількість пар, що розпалися внаслідок освітлення $N_{Fe,0}$ як функцію t_{ill} . Дослідження проводилися на серії зразків при різних інтенсивностях освітлення та температурах, за умов УЗН та без нього. Типові результати наведені на рис.4.

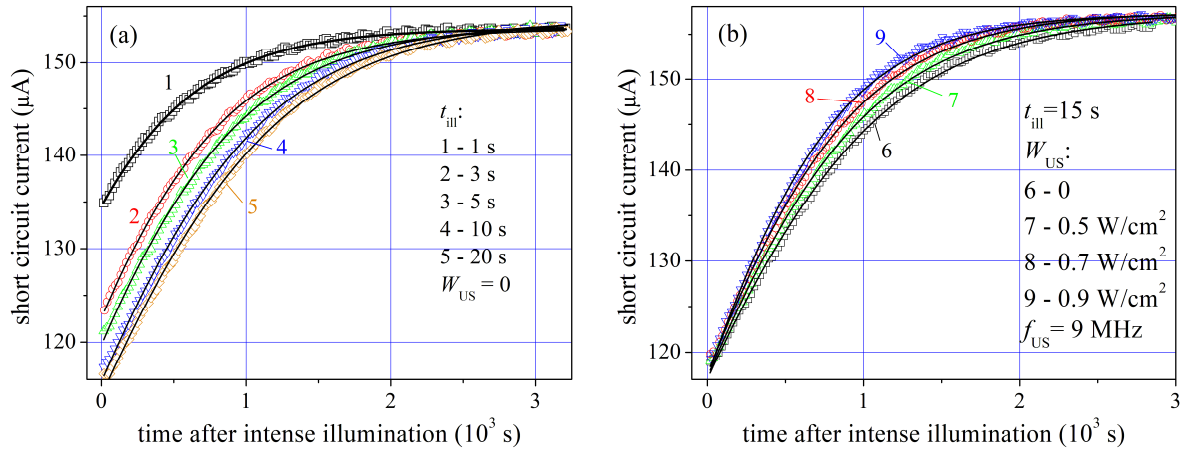


Fig.3. Typical kinetics of short circuit current after intensive illumination with different (**various??**) duration (a) and USL intensity (b). The marks are the experimental results, the lines are the fitted curves using Eqs. (1)-(9). t_{ill} , s: 1 (curve 1), 3 (2), 5 (3), 10 (4), 15 (6-9), 20 (5). W_{US} , W/cm²: 0 (1-6), 0.5 (7), 0.7 (8), 0.9 (9). $f_{US}=9\text{MHz}$, $T=340\text{ K}$.

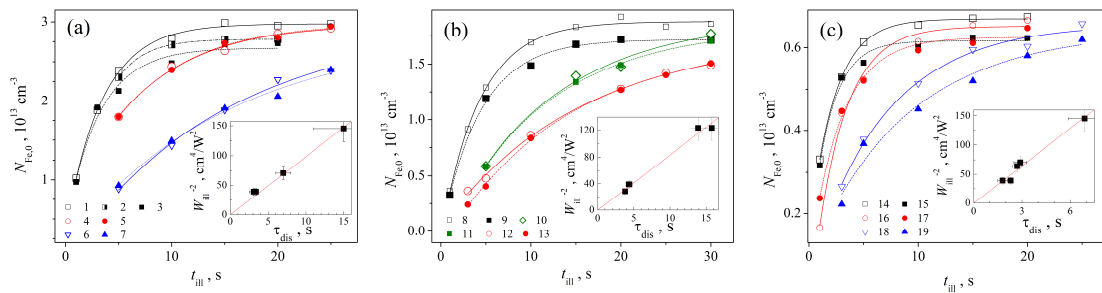


Fig.4. Залежності концентрації міжвузольних атомів, утворених в результаті світло-індукованої дисоціації, від часу освітлення. The marks are the experimental results, the lines are the fitted curves using Eq. (10). Порожні точки та суцільні лінії відповідають випадку відсутності УЗН, заповнені точки та штрихові лінії – випадку УЗН. W_{ill} , W/cm²: 0.16 (криві 1-3, 8-11, 14, 15), 0.12 (4, 5, 16, 17), 0.09 (12, 13), 0.08 (6,7,18,19). W_{US} , W/cm²: 0.9 (2, 5, 7), 0.6 (3, 9, 11, 13), 0.1 (15, 17, 19). f_{US} , MHz: 9,0 (2, 3, 5, 7), 0.3 (9, 11, 13), 5,0 (15, 17, 19); T , K: 340 (1-9,12-19), 320 (10,11). Samples #350_1 (a), #350_2 (b), #349_1 (c). Insets: τ_{dis} are plotted against W_{ill}^{-2} . The lines are the curves fitted by $\tau_{dis} = \text{const} * W_{ill}^{-2}$.

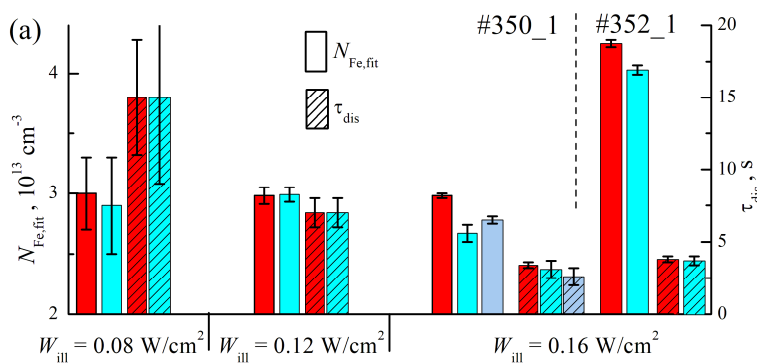
Отримані результати свідчать, що зі збільшенням часу освітлення величини $N_{Fe,0}$ зростають, поступово досягаючи насичення. Це цілком збігається з результатами попередніх досліджень [], які передбачають експоненційне зменшення концентрації пар за збільшенням часу освітлення. Насичення має відповідати ситуації розпаду всіх існуючих

пар. Отримані експериментальні залежності були апроксимовані використовуючи наступну формулу

$$N_{Fe,0}(t_{ill}) = A \exp(-t_{ill} / \tau_{dis}) + N_{Fe,fit}, \quad (9)$$

де τ_{dis} – характерний час дисоціації, $N_{Fe,fit}$ – величина, що відповідає насиченню. Приклади апроксимаційних кривих наведено на рис.4, а отримані в результаті апроксимації значення параметрів - на Рис.5. Порівнюючи (8) та (9) бачимо, що $\tau_{dis}^{-1} = K_a + K_d$, $N_{Fe,fit} = N_{tot} K_d / (K_a + K_d)$. Зауважимо, що в нашому випадку (див далі) $\tau_{ass} \gg \tau_{dis}$ (без УЗН $\tau_{ass} \approx 700$ с при 340 K та $\tau_{ass} \approx 13000$ с при 300 K). Тому $K_d \gg K_a$ і $\tau_{dis}^{-1} \approx K_d$, $N_{Fe,fit} \approx N_{tot}$.

Якщо говорити про випадок відсутності УЗН, то можна зауважити наступне. По-перше, для кожного зразка величина $N_{Fe,fit}$ залишається постійною незалежно від інтенсивності освітлення та температури (червоні та рожеві незаштриховані bars на Рис.5). Це цілком очікувано, якщо вважати що в такому випадку $N_{Fe,fit} = N_{Fe,tot}$. По-друге, величина τ_{dis} (заштриховані bars на Рис.5) залежить від W_{ill} та T . It is well known [] that the dissociation rate of FeB pair increase quadratically with increasing illumination intensity. На вставках Рис.4 відкладені значення τ_{dis} against W_{ill}^{-2} . Лінійність отриманих залежностей цілком збігається з літературними даними і додатково свідчить на користь використання запропонованого підходу для оцінки параметрів iron-related defects. Крім того, відомо [Appl.Phys.Lett **63** 3044], що the dissociation time decreases approximately twice per 20°C increase. В нашому випадку для зразка #350_2 (Figs.4(b) and 5(b)) при $T=320$ K $\tau_{dis} \approx 11 \pm 4$ с, а при 340K – $4,3 \pm 0,3$, що відповідає очікуванню.



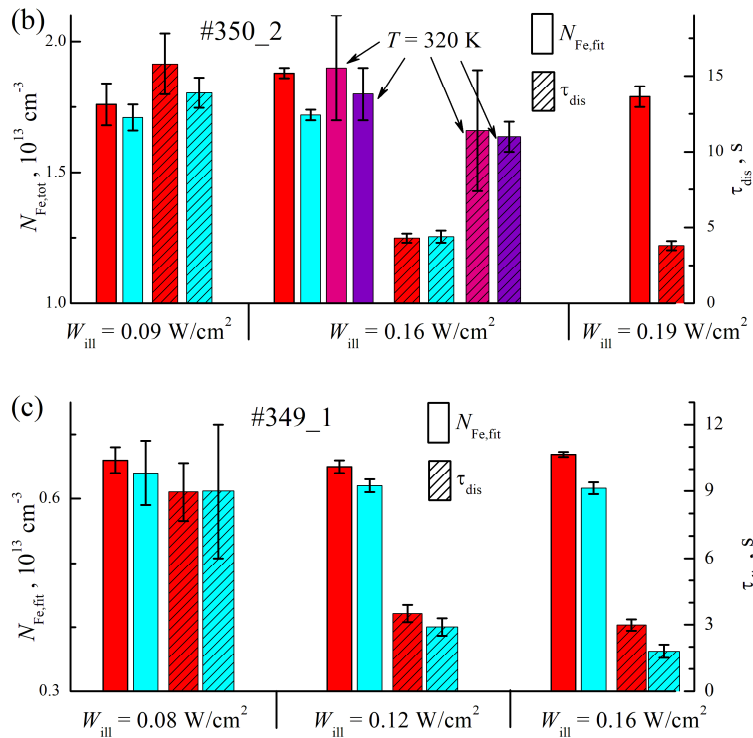


Fig.5. Значення максимальної концентрації світло-звільнених атомів заліза (незаштриховані bars) та характерного часу дисоціації (заштриховані bars), отримані шляхом апроксимації експериментальних залежностей відповідно до формули (10). Червоні bars відповідають відсутності УЗН, блакитні – випадку УЗН. Фіолетові та рожеві bars (panel b) отримані для температури 320 К, решта – 340. Умови УЗН зразків #350_1, #350_2, #349_1 тотожні наведеним у підпису до Рис.3. Для #352_1 fUS=5,9 MHz, WUS=1,0 W/cm²

Ще одним свідченням доцільності аналізу кінетики ISC є виявлена поведінка τ_{other} . У випадку, коли τ_{ill} відповідає значенням $N_{Fe,0}$, близьким до насичення, іншими рекомбінаційними каналами можна знехтувати ($\tau_{other} > 100$ ms). Коли ж значення τ_{ill} невеликі, то τ_{other} змінюється в діапазоні 10^{-6} - 10^{-4} с, зростаючи зі збільшенням часу освітлення. В межах запропонованого наближення, це означає, що частина пар FeB не розпалася і величина τ_{other} пов'язана саме з рекомбінацією на iron-related дефектах, які не перебудовуються при збереженні зразка в темряві. Для перевірки цієї гіпотези були

проведені розрахунки величина $\tau_{other}^{calc} = \left(\left(\tau_{SRH}^{Fei} \right)^{-1} + \left(\tau_{SRH}^{FeB} \right)^{-1} \right)^{-1}$, де τ_{SRH}^{Fei} та τ_{SRH}^{FeB} розраховувались за формулою (3) для значень концентрацій дефектів $N_t^{Fei} = N_{Fe,eq} (N_{Fe,tot} - N_{Fe,0})$ та $N_t^{FeB} = N_{Fe,tot} - N_{Fe,0} - N_t^{Fei}$, відповідно. На рис.6 наведено порівняння τ_{other}^{calc} та τ_{other} , отриманих для однакових умов. Видно, що величини достатньо добре збігаються.

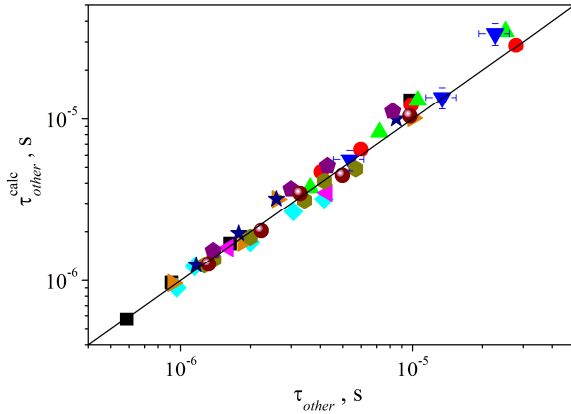


Fig.6. τ_{other} are plotted against those calculated from NFe0 and NFe,fit values (see text). Різні точки відповідають різним зразкам та різним умовам освітлення. The black solid line is the identify line servings as the references.

Повертаючись до впливу акустичних хвиль на процеси світло-індукованого розпаду пар FeV зауважимо наступне. По-перше, УЗН фактично не впливає на величину τ_{dis} : на рис.5 висоти сусідніх заштрихованих червоних та блакитних стовпчиків однакові у межах похибки для всіх випадків. По-друге, при ультразвуковому навантаженні частина пар не розпадається: $N_{Fe,fit}(WUS>0) < N_{Fe,fit}(WUS=0)$. Величина ефекту залежить від інтенсивності УЗ (see Figs.4(a), 5(a), $Will=0.16 \text{ W/cm}^2$) і при максимальних використаних значення Wus досягає 10%. Зауважимо, що цей ефект спостерігається лише у випадку, коли світло-індукований розпад пар близький до насичення. Якщо ж $Will$ (або температура) такі, що при даних часах освітлення частина атомів заліза залишається поблизу заміщуючих атомів бору, то $N_{Fe,fit}(WUS>0) \approx N_{Fe,fit}(WUS=0)$.

Також було встановлено, що УЗН leads to accelerate FeV pair association – see. Fig.3(b). Як видно з рисунку, основним наслідком збудження ультразвуку в структурі є зменшення тривалості відновлення струму короткого замикання. Так як при апроксимації експериментальних залежностей $ISC(t)$ вважалося, що передекспоненційний множник в (5) не залежить від УЗН (визначається лише температурою та рівнем легування бази), то для кількісної характеристики ефекту використовувалася зміна енергії міграції ΔE_{US} . Тобто, вважалося, що

$$E_m \xrightarrow{\text{ultrasound}} E_{m,0} - \Delta E_{US}, \quad (13)$$

where $E_{m,0}$ is the migration energy, **визначена без УЗН**, ΔE_{US} is the AI change in this value. It is seen from Fig.3b, ΔE_{US} depends on acoustic wave intensity. На Рис.7 представлені залежності $\Delta E_{US} = \Delta E_{US}(W_{US})$ при використанні ультразвуку різної частоти та у випадку УЗН структур з різною концентрацією заліза (визначеною за залежностями, подібними до представлених на Рис.4). З наведених даних видно

- 1) ΔE_{US} практично лінійно залежить від інтенсивності ультразвуку;
- 2) Ефективність AI change in migration energy decreases as the US frequency increases; transverse waves, despite their low frequency, less strongly impact the processes of iron ion diffusion;
- 3) the magnitude of AI effect does not practically depend on iron concentration;
- 4) величина AI змін енергії міграції може досягати 13 меВ.

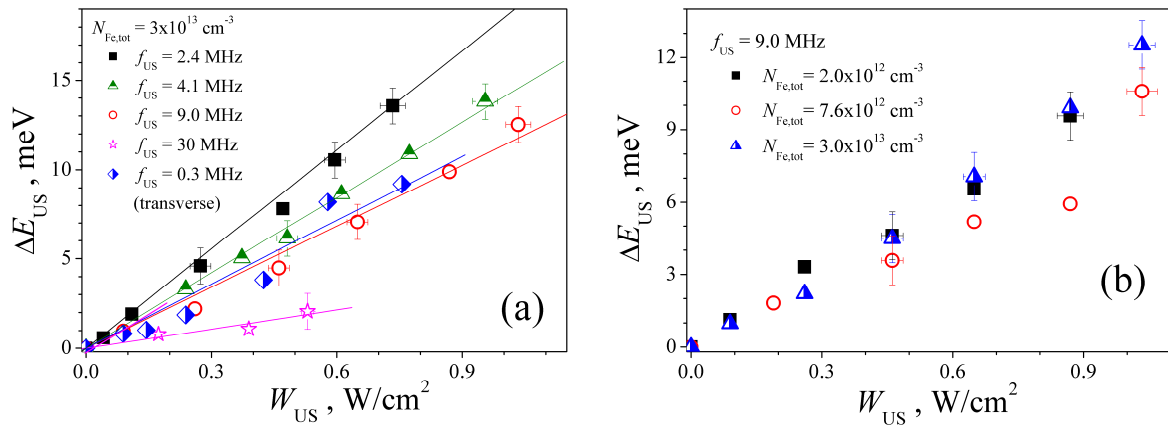


Fig.7. Dependences of AI change in migration energy on US intensity for various frequencies (a) and samples with various iron concentrations (b). $T=340 \text{ K}$. Точки отримані в результаті апроксимації експериментальних залежностей, the lines are the linear fitted curves.

Залежності ΔE_{US} від інтенсивності освітлення не виявлено.

Дані, наведені на Рис.7 отримані при температурі 340 K. При зменшенні температури AI ефект послаблюється – див. рис.8. Як видно з рисунку, залежності ΔE_{US} від температури близькі до лінійних:

$$\Delta E_{US}(T) = \Delta E_{US}(0) + \alpha_{US} T. \quad (8)$$

де температурний коефіцієнт α_{US} залежить від частоти ультразвуку (see. Inset on Fig.8), $\Delta E_{US}(0)$ визначається також і потужністю акустичних хвиль.

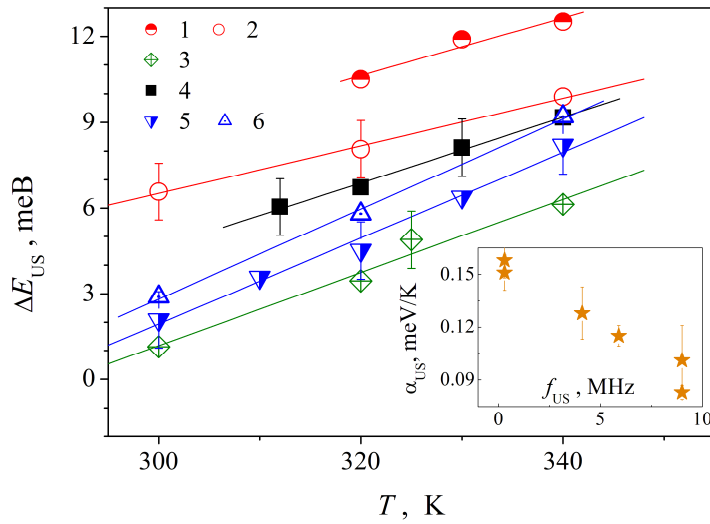


Fig.8. Temperature dependencies of ΔE_{US} . $N_{Fe,tot}$, 10^{13} cm^{-3} : 3.0 (curve 1 and 2), 4.3 (3), 1.9 (4). f_{US} , MHz: 9.0 (1,2), 4.1 (3), 5.9 (4), 0.3 (5,6). W_{us} , W/cm²: 1 (1), 0.87 (2), 0.48 (3), 1.0 (4), 0.58 (5), 0.76 (6). The marks are the experimental results, the lines are the linear fitted curves. Inset: Частотна залежність температурного коефіцієнта ΔE_{US} .

Зрозуміло, що аналіз можливих причин УЗ впливу має відштовхуватися від механізмів перебудови iron-related defects. В літературі вважається, що розпад пари FeB є двостадійним. First electron capture process leads to a neutralization of the Fe_i^+ which removes the Coulombic attraction between Fe_i^0 and B_s^- . Second electron capture results in a deposition of diffusion barrier energy and in a spatial dissociation of atoms. In the literature, two possibilities are discussed: second capture which leads to a negative charge state (Fe_i^-) and consequently to a Coulombic repulsion of the $Fe_i^-B_s^-$ pair and second capture depositing the necessary Fe_i^0 migration energy after recombination with a hole. The second way is known as recombination-enhanced defect reaction (REDR) and is caused by strong electron-lattice coupling at the defect.

Щодо асоціації, то вона happens due to Fe_i^+ field-assisted migration to B_s^- []. Therefore, the more detailed expression for τ_{ass} takes the following form [18,20,36]:

$$\tau_{ass} = \frac{\epsilon \epsilon_0 kT}{q^2 D_{Fe} N_B} = \frac{\epsilon \epsilon_0 kT}{q^2 D_{0,Fe} N_B} \exp\left(\frac{E_m}{kT}\right), \quad (11)$$

$$\text{де } D_{Fe} = D_{0,Fe} \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right), D_{0,Fe} = \beta_a v a_0 \exp\left(\frac{\delta S_{Fe}}{k}\right)$$

β is a correlation factor, v is an effective vibrational (attempt) frequency, a_0 is a jump distance, δS_{Fe} is the migration entropy.

Для неп'єзоелектричних матеріалів основний вплив акустичної хвилі пов'язаний з виникненням механічних напруг (stress). These are known several stress-related mechanisms of impurity diffusivity variation [1]. Наприклад, в роботах [2] показано, що внаслідок існування в кристалі статичних напруг σ_{stat} може відбуватися зменшення енергії міграції домішок на величину $\Delta E = \sigma_{\text{stat}} V^*$, where V^* is the activation strain tensor. Відомо, що при поширенні УЗ в кристалі виникають статичні деформації (strain) [3]:

$$u_{\text{stat}} = \frac{\beta}{8} \left(\frac{2\pi f_{\text{US}} u_{\text{US}}}{v_{\text{US}}} \right)^2 = \frac{\beta W_{\text{US}}}{4\rho_{\text{Si}} v_{\text{US}}^3}, \quad (13)$$

де β is an acoustic nonlinearity parameters, $u_{\text{US}} = \frac{1}{\pi f_{\text{US}}} \sqrt{\frac{W_{\text{US}}}{2\rho_{\text{Si}} v_{\text{US}}}}$ is the amplitude of lattice atom displacements. Тобто ефект має бути лінійним по відношенню до інтенсивності звуку, що збігається з експериментальними даними. Проте, відомо, що $V^* = 0,01-0,2\Omega$, де Ω is the atomic volume ($\sim 2 \cdot 10^{-29} \text{m}^3$ для кремнію), а величина множника залежить від домішки. Якщо розглядати поширення повздовжніх хвиль в напрямку [100] ($\beta = 2,0003$ [4], $\sigma_{\text{stat}} = c_{11} u_{\text{stat}}$, $c_{11} = 166 \text{ GPa}$), то для $W_{\text{US}} = 1 \text{ W/cm}^2$ отримаємо $\Delta E = 5 \cdot 10^{-11} \text{ eV}$. Тобто цей механізм не може бути причиною виявленого ефекту.

According to the data [5], дифузія домішок в ультразвуковому полі може відбуватися внаслідок пружних полів. А саме, the energy of the interaction between one defect and the strain field is given by [6]

$$E_{\text{int}}(x, t) = -K\Omega_d \xi(x, t), \quad (13)$$

де K is the bulk modulus (102 GPa for Si), Ω_d is the variation of the crystal volume as the result of point defect formation, for interstitial defect $\Omega_d = (1.7 \div 2.2)\Omega$ [7], ξ is the lattice deformation by acoustic wave. Оцінки максимальної взаємодії для $W_{\text{US}} = 1 \text{ W/cm}^2$ дають величину $E_{\text{int}} \sim 0.1 \text{ meV}$. І хоча в роботі [8] сказано, що у випадку кластерів, які містять N_t дефектів, може спостерігатися колективний ефект, коли $E_{\text{int}} \rightarrow N_t E_{\text{int}}$

на нашу думку даний механізм не може бути основним для виявленого Al ефекту прискорення асоціації пар FeB.

В свою чергу, найбільш ймовірною причиною зменшення τ_{ass} є описані в [9] процеси impurity interaction with nonequilibrium excitations of the crystal lattice, **що приводять до** change of the probability of diffusion transitions. According to [10], the US influence consists in an increase of the effective temperature of the crystal and in an effective decrease of the 'polaron' activation energy. Last one connected with the transfer of the lattice deformation around the impurity during the diffusion transition [11].

Зауважимо, що відповідно до розрахунків [], цей ефект лінійно має залежати від інтенсивності УЗ та температури, що збігається з експериментально виявленими особливостями AI змін. Крім того, відповідно до [], $\Delta E_{US} \sim t_s$, where t_s is phonon collision time, що може пояснити виявлену частотну залежність ефекту.

Щодо дисоціації, то в цьому випадку варто приділити увагу можливому впливу УЗ на процеси захоплення носіїв заряду. Наприклад, в [] запропоновано, що в умовах УЗН можуть змінюватися capture cross sections для комплексних дефектів внаслідок зміни ефективної відстані між складовими. Причому очікується, що подібний ефект має бути особливо суттєвим для комплексів, компоненти яких характеризуються Ω_d з різним знаком. Для FeB спостерігається саме така ситуація: $\Omega_d(\text{Fe}) > 0$, $\Omega_d(\text{Bs}) < 0$ і тому цей комплекс має бути акустоактивним з точки зору процесів захоплення носіїв заряду. Проте, на нашу думку, процеси AI змін $\sigma(p)$ мали б, насамперед, впливати на характерний час дисоціації, тоді як подібні ефекти не виявлені. AI зростання Ка мало б зменшувати $N_{\text{Fe,fit}}$ (див Eqs.(),()), проте цей ефект нівелюється суттєвою різницею величин t_{dis} та t_{ass} . Тому, напевно, УЗ впливає на другу стадію розпаду. З одного боку, авторами [] показано, що в умовах УЗН кремнію внаслідок зміни положення домішки відносно оточуючих атомів спостерігається зменшення термічної енергії активації носія, захопленого дефектом (до ~ 10 meV при інтенсивностях звуку, співмірних з використаними в даній роботі). Подібне підсилення electron emission в нашому випадку має зменшити рівноважну частку негативно заряджених іонів заліза, які відчувають Coulombic repulsion with Bs^- . З другого боку, в роботі [] показано, що УЗН невисокої інтенсивності викликає перебудову частини пар в метастабільну конфігурацію, яка має іншу симетрію (orthorhombic) та характеризується більшою відстанню між компонентами. При надпорогових інтенсивностях УЗ подібне просторове розділення компонент викликає повний розпад пари []. Проте в нашому випадку важливим є те, що збільшення відстані послаблює Coulombic repulsion. Нарешті, УЗН може бути причиною послаблення electron-lattice coupling at the defect as well as REDR process.

У багаточисленних роботах, див., наприклад [], показано що під час таких технологічних операцій як температуро-стимульована дифузія легуючих домішок чи створення просвітлюючого шару відбувається також і гетерування атомів заліза. Це є наслідком дифузії іонів заліза до на різноманітних стоків. Якщо подібні процедури проводити в ультразвуковому полі, то, відповідно до отриманих результатів, можна очікувати підвищення ефективності гетерування внаслідок збільшення

об'єму, з якого іони Fe будуть збиратися (*мається на увазі як гриби з якоїсь галявини, так і атоми заліза з об'єму*) на стоках.

CONCLUSION

В роботі проведено експериментальне дослідження впливу ультразвуку на процеси перебудови пар FeB в кремнієвих silicon n+–p–p+ structures at near room temperatures. The investigation has revealed an acoustically driven decrease in both the частки пар FeB, які дисоціюють під дією світла and migration energy of iron ions. The last effect linearly depends on ultrasound intensity; the temperature decreasing and the ultrasound frequency increasing results in reducing of the effect effectiveness. The analyses has shown that these phenomenon are caused by the impurity interaction with nonequilibrium excitations of the crystal lattice and the acoustically driven attenuation of Coulombic repulsion, **викликаним** increase in the distance between pair components and/or **зміною зарядового стану дефекта**. Thus, ultrasound can be an effective functional tool for controlling silicon structure characteristics.