

01; 05

© 1992

## РОЛЬ АНТИСТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ ПРИ ДИФФУЗИИ ПРИМЕСИ ПО УЗЛАМ И МЕЖУЗЛИЯМ В БИНАРНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

А.О. Константинов

В элементарном полупроводнике диффузия примеси по узлам и межузлиям происходит либо по диссоциативному механизму, либо же по механизму вытеснения (*kick-out*) [1-3]. Эти два механизма соответствуют двум основным типам точечных дефектов элементарного полупроводника - вакансиям и собственным межузельным атомам. Диффузия примеси в бинарном полупроводнике ранее рассматривалась в рамках этих же механизмов, как непосредственная аналогия диффузии в элементарном кристалле [4-8]. Если примесь располагается в узле типа А в полупроводнике АВ, то предполагалось, что взаимодействие примеси с собственными точечными дефектами следует рассматривать в пределах А-подрешетки, рис. 1, а. На самом деле точечные дефекты двух подрешеток бинарного полупроводника не являются независимыми. Они взаимодействуют через антиструктурные дефекты.

В настоящей работе показано, что помимо двух механизмов, аналогичных механизмам диффузии в элементарном кристалле, существует также специфический для бинарного материала механизм, связанный со взаимообменом соответственных дефектов двух подрешеток. Он состоит в том, что вакантные узлы А-типа ( $V_A$ ), занимаемые примесью в объеме кристалла, поставляются в объем в результате миграции вакансий и межузельных атомов подрешетке В,  $V_B$  и  $V_F$ , рис. 1, б. Взаимодействуя с антиструктурными дефектами, вакансии В-подрешетки превращаются в  $V_A$ . Основная особенность механизма взаимообмена состоит в том, что он связан с одновременной миграцией собственных точечных дефектов как минимум двух типов. Концентрационно зависимый коэффициент диффузии примеси  $F, D_F$ , определяется соотношением:

$$\frac{f_F}{CD_F} = \frac{1}{R} + \frac{1}{S}, \quad (1)$$

где  $S = S_A + S_m$ ,  $1/S_m = 1/S_{as} + 1/S_B$ ,  $C$  - концентрация примеси, величины  $R$  и  $S_j$  - темпы диффузии примеси и самодиффузии, определяемые соотношениями (8-13) как произведения концентраций подвижных частиц на их коэффициенты диффузии,  $S_A$  и  $S_B$  соответствуют дефектам собственно А и В подрешеток,  $S_{as}$  - антиструк-

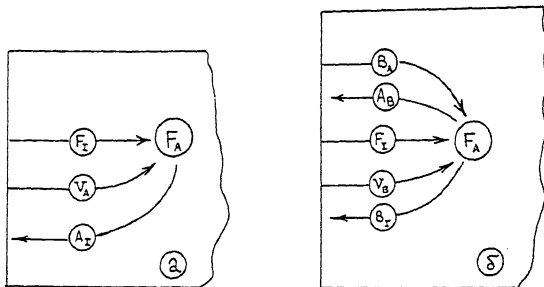


Рис. 1. Взаимодействие примеси ( $F$ ) и собственных точечных дефектов. а - при диффузии в элементарном кристалле, б - при диффузии с участием взаимобмена собственных точечных дефектов бинарного кристалла.

турным дефектам,  $f_F$  - фактор тянущего поля,  $f_F = (kT)^{-1} d\mu_F/d\ln C$ , где  $\mu_F$  - химпотенциал узельной примеси.

В соответствии с (1), протекание примеси через тонкую пластину, мысленно выделенную из объема кристалла, может быть уподоблено протеканию электрического тока в цепи, показанной на рис. 2. Величины  $\mathcal{R}$  и  $S_f$  соответствуют проводимости элементов. При  $\mathcal{R} \ll S$  протекание примеси ограничивается ее собственной подвижностью. При  $\mathcal{R} \gg S$  примеси не хватает вакантных узлов в объеме кристалла, и коэффициент диффузии определяется уже свойствами собственных точечных дефектов. Характер неравновесных процессов целиком определяется соотношением между  $S_A$ ,  $S_B$  и  $S_{AS}$ . При  $S_A \gg S_m$  влияние дефектов В-подрешетки будет слабым, неравновесные процессы будут идентичны процессам в элементарном кристалле. При  $S_A \ll S_m$  диффузия примеси будет целиком контролироваться процессами взаимобмена дефектов. При  $S_{AS} \ll S_B$  аналогия с элементарным полупроводником будет по-прежнему достаточно близкой, в роли вакансий будут выступать дефекты  $B_A$ , а в роли межузельных атомов -  $A_B$ . Наконец, при большом отношении  $S_{AS}/S_B$  примесь может взаимодействовать с дефектами "чужой" подрешетки столь же эффективно, сколь с дефектами своей собственной.

Процессы взаимодействия примеси  $F$  и точечных дефектов описываются следующими уравнениями квазихимических реакций:

$$F_A + A_I = F_I, \quad (2)$$

$$A_I + V_A = A_A, \quad (3)$$

$$B_I + V_B = B_B, \quad (4)$$

$$A_I + V_B = A_B, \quad (5)$$

$$B_I + V_A = B_A, \quad (6)$$

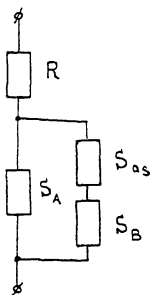


Рис. 2. Электротехническая аналогия для диффузии примеси в бинарном полупроводнике. Величины  $R$  и  $S_j$  соответствуют проводимостям элементов.

где символ ( $F, A, B$  или  $V$ ) обозначает тип частицы, а индекс — положение (узел  $A$  — или  $B$  — типа, или же межузле, 1). Из восьми компонент, участвующих в реакциях, лишь три являются независимыми. В качестве независимых компонент мы будем рассматривать узельные атомы примеси  $F_A$  и собственные межузельные атомы  $A_I$  и  $B_I$ . Согласно [9], потоки примеси и дефектов  $q_i$  имеют вид

$$-q_i = L_i X_i + \sum_{j \neq i} L_{ij} X_j, \quad (7)$$

где  $L_i, L_{ij}$  — коэффициенты Онсагера, связывающие потоки компонент с движущими силами — градиентами химпотенциалов  $X_i, X_j$ . Потоки  $q_A, q_B$  включают в себя как собственно потоки  $A_I$  и  $B_I$ , так и потоки их продуктов реакций. Согласно принципу взаимности [9],  $L_{ij} = L_{ji}$ . Предполагая, что потоки подвижных компонент определяются лишь величинами градиентов их химпотенциалов и учитывая реакции образования дефектов (2–6), мы получаем значения:  $L_F = R/kT$ ,  $L_{FA} = R/kT$ ,  $L_A = (R + S_A + S_{AS})/kT$ ,  $L_B = (S_B + S_{AS})/kT$ ,  $L_{AB} = -S_{AS}/kT$ . Величины  $R$  и  $S_j$  — характерные темпы диффузии примеси и темпы самодиффузии, связанные с соответствующими группами дефектов. Величины  $S_j$  определяются соотношениями:

$$S_A = s_{AI} I_A + s_{AV} / I_A, \quad (8)$$

$$S_B = s_{BI} I_B + s_{BV} / I_B, \quad (9)$$

$$S_{AS} = s_{AB} I_A / I_B + s_{BA} I_B / I_A, \quad (10)$$

где  $I_A, I_B$  — отношение концентраций  $A_I$  и  $B_I$   $C_{AI}, C_{BI}$  к равновесным величинам  $C_{AI}^e, C_{BI}^e$ ,  $I_A = C_{AI} / C_{AI}^e$ ,  $I_B = C_{BI} / C_{BI}^e$ ;

$S_D$  — темп самодиффузии каждого из 6-ти типов собственных дефектов в равновесии, определяемый соотношением:

$$s_D = \sum_k C_{Dk}^e D_{Dk} \quad (11)$$

В соотношении (11)  $C_{Dk}^e$  — равновесная концентрация зарядового состояния  $k$  дефекта  $D$ ,  $D_{Dk}$  — коэффициент диффузии данного состояния. Согласно [9], величина  $s_D$  связана со вкладом дефекта — типа в коэффициент самодиффузии  $D_{SD}$  соотношением

$$s_D = f_c D_{SD} / C_S, \quad (12)$$

где  $C_S$  — концентрация узлов в решетке,  $f_c$  — корреляционный фактор, обычно порядка единицы. Величина  $R$  определяется как

$$R = C_{FI} D_{FI} = C D_F^{iso} I_A, \quad (13)$$

где  $C_{FI}$  и  $D_{FI}$  — концентрация и коэффициент диффузии межузельной примеси,  $F_I$ ,  $D_F^{iso}$  — изоконцентрационный коэффициент диффузии. Мы будем предполагать, что концентрация примеси достаточно велика и пренебрежем накоплением точечных дефектов в объеме кристалла в сравнении с накоплением примеси. Это дает условие равенства нулю потоков  $q_A$  и  $q_B$ . Все потоки возникают в конечном итоге как следствие переменной концентрации примеси. Понимая коэффициент диффузии  $D_F$  как коэффициент пропорциональности между потоком  $q_F$  и  $-\partial C / \partial x$  и используя условия  $q_A = 0$ ,  $q_B = 0$ , мы получаем соотношение (1) и выражения для  $I_A$  и  $I_B$ :

$$\frac{d \ln I_A}{d \ln C} = -f_F \frac{R}{R+S}, \quad (14)$$

$$\frac{d \ln I_B}{d \ln I_A} = \frac{S_{AS}}{S_{AS}+S_B}. \quad (15)$$

Выражения для  $D_F$  в форме (1) в точности совпадают с коэффициентом диффузии примеси по углам и межузлиям в элементарном кристалле, использовавшимся ранее в [10] для анализа диффузии фосфора в кремнии. Однако в бинарном кристалле величина  $S$  включает не только вклад процессов в пределах А-подрешеток,  $S_A$ , но также и вклад смешанных процессов. Как следует из (14, 15), равновесие в системе собственных точечных дефектов нарушается тогда, когда темп диффузии примеси превосходит темп самодиффузии,  $R > S$ . В пределе низкой концентрации или подвижности антиструктурных дефектов,  $S_{AS} < S_B$ , диффузия примеси не оказывает какого-либо влияния на равновесие в системе дефектов подрешетки В. При  $S_{AS} > S_B$ , согласно (15), неравновесные процессы развиваются одновременно в обеих подрешетках.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] G ö s e l e U., T a n T.Y. In: Defects in Semi-conductors II, MRS Proc. Symp. Ser. V.14./Ed by S. Mahajan, J. Corbett. North Holland Publ, 1983. P. 45-60.
- [2] F r a n k W., G ö s e l e U., M e h r e r H., S e e g e r A. In: Diffusion in Crystalline Solids./Ed. by G.E. Murch, A.S. Nowich. Academic Press, 1984. P. 64-112.
- [3] F a h e y P.M., G r i f f i n P.B., P l u m m e r J.D. // Rev. Mod. Phys. 1989. V. 61. N 2. P. 289.
- [4] К э й с и Х. Диффузия в полупроводниках  $A^{\text{II}}B^{\text{IV}}$  В кн.: Атомная диффузия в полупроводниках. / Под ред. Д. Шоу. М.: Мир, 1975. С. 406-493.
- [5] G ö s e l e U., M o r e h e a d F.F. // J. Appl. Phys. 1981. V. 52. N 7. P. 4617-4619.
- [6] T u c k B. // J. Phys. D. 1985. V. 18. N 4. P. 557-584.
- [7] S o h e n R.M. // J. Appl. Phys. 1990. V. 67. N 12. P. 7268-7273.
- [8] G ö s e l e U.M., T a n T.Y. // MRS Bulletin. 1991. V. 18. N 11. P. 42-46.
- [9] М а н н и н г Дж. Кинетика диффузии атомов в кристаллах. М.: Мир, 1971. 277 с.
- [10] К о н с т а н т и н о в А.О. // ФТП. 1992. Т. 26. В. 2. С. 339-351.

Физико-технический институт  
им. А.Ф. Иоффе РАН,  
С.-Петербург

Поступило в Редакцию  
13 марта 1992 г.  
В окончательной редак-  
ции 4 ноября 1992 г.