МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

КУШЛИК МАРКІЯН ОЛЕГОВИЧ

УДК 53.09; 535.376; 539.37; 548.4; 621.315.592

ДЕФОРМАЦІЙНІ ПРОЦЕСИ ТА ДИСЛОКАЦІЙНА ЕЛЕКТРОЛЮМІНЕСЦЕНЦІЯ В ПРИПОВЕРХНЕВИХ ШАРАХ КРИСТАЛІВ *p*-Si

01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ – 2016

Дисертацією є рукопис

Робота виконана на кафедрі сенсорної та напівпровідникової електроніки Львівського національного університету імені Івана Франка

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Павлик Богдан Васильович,
завідувач кафедри сенсорної та напівпровідникової електроніки Львівського національного університету імені Івана Франка

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Неділько Сергій Герасимович,
завідувач науково-дослідної лабораторії спектроскопії конденсованого стану речовин Київського національного університету імені Тараса Шевченка

доктор фізико-математичних наук, професор
Сливка Олександр Георгійович,
завідувач кафедри оптики Ужгородського національного університету

Захист дисертації відбудеться « 20 » жовтня 2016 р. о 15.^{30} на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.051.09 при Львівському національному університеті імені Івана Франка за адресою: 79005, м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8, фізичний факультет, Велика фізична аудиторія.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Львівського національного університету імені Івана Франка за адресою: 79005, Україна, м. Львів, вул. Драгоманова, 5.

Автореферат розісланий « 14 » вересня 2016 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради,
професор Б. В. Павлик

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Кремній має перевагу перед іншими напівпровідниками в сучасній мікроелектроніці завдяки доступності, розвитку технологій вирощування та обробки. Стрімкий розвиток кремнієвої мікро- та наноелектроніки потребує вирішення нових актуальних завдань, пов'язаних з необхідністю впровадження оптоелектронних компонентів передачі інформації. Проблема використання кремнію в побудові замкнутого циклу оптоелектронної технології полягає в тому, що випромінювальна рекомбінація в ньому на кілька порядків нижча, ніж у прямозонних напівпровідниках. Одним з перспективних шляхів вирішення цієї проблеми є виготовлення світловипромінювальних структур з дислокаційною люмінесценцією (ДЛ), що виявлена в кремнії з високою концентрацією дислокацій. Ідея застосування ДЛ для підвищення випромінювальної рекомбінації є перспективною, оскільки дислокаційні дефекти та пов’язані з ними дефектно-домішкові комплекси мають низький ступінь часової деградації. Енергія випромінювання центрів, відповідальних за довгохвильову область дислокаційної люмінесценції (1.2 – 1.6 мкм), збігається з вікном найбільшої прозорості волоконної оптики і знаходиться в області прозорості кремнію. У зв’язку з цим перспективи створення високоефективних світловипромінювальних структур, які використовують робочу довжину хвилі лінії Д1 (λ=1,54 мкм), викликають значний інтерес. Незважаючи на те, що вивчення ДЛ почалося понад 25 років тому і накопичено велику кількість експериментальних даних, ні механізми утворення центрів дислокаційної люмінесценції, ні відповідні рекомбінаційні процеси за участі структурних дефектів в літературі однозначно не представлені.

Основним способом введення дислокацій в кремній залишається пластична деформація кристалу. Дислокації, в свою чергу, здатні ефективно гетерувати точкові структурні дефекти з об'єму і приповерхневої області кристалу, що може призвести до утворення на них додаткових каналів рекомбінації носіїв заряду, і, як наслідок, до зміни величини інтенсивності та вигляду енергетичного спектру ДЛ. Тому виникає необхідність дослідження механізмів впливу домішок та технологічних операцій на характеристики ДЛ.

Концепція деформації кремнію спирається, в основному, на зміну рівноваги кристалічної ґратки кремнію та дії зовнішніх напружень. Через модифікування кристалічної ґратки змінюється характеристика електронно-зонної структури кремнію. Зміна рухливості носіїв заряду, їх перерізу захоплення, концентрації дефектів та інших параметрів веде до зміни загальної електропровідності та істотно залежить від величини, напрямку і типу деформації кристала.

Механічні напруження в кремнієвій підкладці також можуть бути викликані нарощуванням на ній металічної або діелектричної плівки. Механічні напруження в площині стику плівки і підкладки виникають через невідповідність параметрів їх ґраток, наприклад, невідповідність параметрів

кристалічних ґраток кремнію і алюмінію є близько 25% [4]. Під впливом двоосьової деформації носії заряду мають, як правило, на ~ 60% більшу рухливість, що призводить до зменшення опору в напруженому шарі Si [9].

При формуванні плівки на поверхні напівпровідника виникають області механічних напружень, в яких можуть локалізуватися різнотипні дефекти. Також ця область може викликати генерування дислокацій, наприклад, при наступній пластичній деформації.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана на кафедрі сенсорної та напівпровідникової електроніки Львівського національного університету імені Івана Франка у відповідності з держбюджетними темами:

♦ "Ефект малих доз радіації в напівпровідникових матеріалах та стабілізація параметрів кремнієвих сенсорів температури" (номер державної реєстрації: 0109U002081).

♦ "Дослідження дії механічних, магнітних та іонізуючих полів на властивості широкозонних напівпровідникових кристалів та поверхнево-бар'єрних структур" (номер державної реєстрації: 0110U001381).

♦ "Створення високоякісних електронних вимірювачів температури з напівпровідниковими термосенсорами на базі кремнієвих p-n переходів" (номер державної реєстрації: 0113U001249).

♦ "Електронні процеси в кремнієвих структурах та створення недорогих сенсорів подвійного призначення на їх основі" (номер державної реєстрації: 0116U001543).

Мета і завдання дослідження. Метою дисертаційної роботи є встановлення механізмів випромінювальної рекомбінації носіїв заряду за участі центрів дислокаційної люмінесценції, а також природи даних центрів та процесів їх перебудови за дії високотемпературного відпалу, зовнішньої пружної та локальної деформації.

У процесі виконання роботи розв'язувались наступні завдання:

- виготовлення експериментальних зразків світловипромінювальних структур (СВС) на основі кристалів p-Si (КДБ-24), що піддавались пластичній деформації;
- вивчення електрофізичних характеристик світловипромінювальних структур;
- дослідження впливу високотемпературного відпалу в атмосфері протічного кисню пластично деформованих кристалів p-Si на характеристики та параметри СВС на їхній основі;
- дослідження впливу пружної деформації на випромінювальні характеристики світловипромінювальних структур на основі дислокаційного кристалу кремнію КДБ-24;

- дослідження дефектної підсистеми та її перебудови в приповерхневому шарі монокристалічного кремнію;
- аналіз процесів еволюції приповерхневих дефектів під впливом зовнішніх полів.

Об'єкт дослідження – світловипромінювальні структури на основі кристалів кремнію з різними концентраціями дислокацій на поверхні (111).

Предмет дослідження – зміни електрофізичних та випромінювальних характеристик світловипромінюючих структур на основі кремнію, що виникають під впливом високотемпературного відпалу в атмосфері проточного кисню, пружної зовнішньої та локальної деформацій.

Методи дослідження. Для досягнення поставленої в роботі мети використано наступні методики дослідження:

- вимірювання електролюмінесценції світловипромінюючих структур на основі кристалів кремнію р-типу провідності;
- отримання вольт-фарадних характеристик та спектрів ємнісно-модуляційної спектроскопії глибоких рівнів кристалів кремнію, на основі яких виготовлялись світловипромінюючі структури;
- оптична, атомно-силова мікроскопія поверхні та електрофізичні дослідження процесів еволюції структурних дефектів та їх комплексів у приповерхневому шарі кремнію;
- інфрачервона спектроскопія коливних рівнів з аналізом параметрів генетичних та генерованих, в процесах обробки, дефектно-домішкових комплексів;
- теоретичне та комп'ютерне моделювання процесів перебудови дефектної підсистеми та енергетичної структури світловипромінюючих структур кристалів кремнію.

Наукова новизна отриманих результатів полягає в отриманні та узагальненні нових наукових результатів:

- вперше досліджено електролюмінесценцію світловипромінюючих структур, виготовлених на основі *p*-Si, що ефективно працюють в широкому діапазоні температур (80-300 К);
- вперше проведено порівняльний аналіз зміни електрофізичних характеристик світловипромінюючих структур *p*-Si–Al зі спектрами електролюмінесценції для встановлення закономірностей перебудови центрів випромінювальної та безвипромінювальної рекомбінації;

- встановлено, що процеси еволюції дефектної структури приповерхневого шару кремнію зумовлені дією локальної деформації поверхні, яка виникає в результаті невідповідності параметрів ґратки матриці та металічної плівки;
- показано визначальну роль власних міжвузлових атомів та фонових домішок (вуглецю та кисню) у процесах перебудови випромінювальних центрів дислокаційної люмінесценції в приповерхневих шарах кристалів *p*-Si;
- встановлено, що немонотонність процесу накопичення заряду на межі Si/SiO_2 та густини поверхневих станів за концентрації дислокацій $> 10^6$ $см^{-2}$, зумовлені процесами еволюції дефектної структури приповерхневого шару кремнію.

Практичне значення результатів роботи.

- Спроектовано та виготовлено стабільні світловипромінюючі структури на основі кристалів кремнію *p*-типу із заданими параметрами та порівняно високою енергетичною ефективністю (~2%) випромінювання в діапазоні довжин хвиль від 1.1 до 1.55 мкм.
- Запропоновані фізичні механізми перебудови дефектної структури приповерхневих шарів кремнію p-типу можуть бути використані при теоретичному моделюванні процесів еволюції дефектів.
- Процеси перебудови дефектної структури кристалів кремнію під дією механічного навантаження (в області пружних деформацій) можуть бути ефективно використані для покращення властивостей структур на їхній основі.

Особистий внесок здобувача. Постановка завдання дисертаційної роботи формулювалась за участю дисертанта. Основна частина експериментальних досліджень виконана здобувачем особисто, отримані результати представлені та опубліковані у співавторстві [1-31]. Дисертантом особисто було виготовлено експериментальні зразки, проведені дослідження (вимірювання та опрацювання) електрофізичних характеристик структур [1, 3-5, 9-12, 16-27]. Автор брав активну участь в обговоренні та інтерпретації експериментальних результатів [9-12, 23-27], а також у написанні наукових статей та доповідей на всеукраїнські та міжнародні конференції.

Результати, що представлені та опубліковані у співавторстві, отримані за безпосередньої участі автора на всіх етапах роботи.

Апробація результатів дисертації. Основні положення та результати дисертаційної роботи доповідались та обговорювались здобувачем особисто на наукових конференціях факультету електроніки Львівського національного університету імені Івана Франка (Львів, 2011 – 2016); 14-ій Міжнародній конференції з фізики і технології тонких плівок і наноструктур (Івано-Франківськ, 2013); Міжнародних конференціях студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “Еврика” (Львів, 2009 – 2015);

VI Всеукраїнській науково-практичній конференції “Проблеми електроніки та інформаційні технології” (Чинадієво, 2015); XXII Международной научной конференции “Релаксационные явления в твердых телах” (Воронеж, 2010); 8-ій, 9-ій Міжнародних школах-конференціях “Актуальні проблеми фізики напівпровідників” (Дрогобич, 2013, 2016); V Міжнародній науково-практичній конференції студентів і аспірантів “Молода наука Волині: пріоритети та перспективи досліджень” (Луцьк, 2011); Конференціях молодих вчених з фізики напівпровідників з міжнародною участю “Лашкарьовські читання” (Київ, 2012, 2015, 2016); IX Международной конференции молодых ученых и специалистов по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, наноразмерных структур и приборов на его основе “КРЕМНИЙ-2012” (Россия, Санкт-Петербург, 2012).

Публікації. Основні результати дисертаційної роботи опубліковані в 31 праці, у тому числі у 12 статтях у міжнародних та вітчизняних реферованих журналах, 15 тезах доповідей на наукових конференціях та 4 патентах на корисну модель.

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається зі вступу, 5 розділів, висновків та списку використаних джерел. Дисертаційна робота викладена на 152 сторінках, містить 62 рисунки, 3 таблиці та список використаних джерел із 163 посиланнями.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми, визначено мету і завдання досліджень, представлено наукову новизну і практичну цінність отриманих результатів. Відзначено особистий внесок здобувача, апробацію наукових результатів, публікацій, структуру і обсяг дисертаційної роботи.

У **першому розділі** подано огляд наукової літератури за темою дисертаційної роботи. В ньому представлені результати аналізу стану проблематики досліджень електрофізичних та випромінювальних характеристик дислокацій в дефектній структурі монокристалічного кремнію. Вказано, що дислокація може виступати, як безвипромінювальним так і випромінювальним каналом рекомбінації носіїв заряду. Зокрема, зроблено акцент на тому, що вплив домішок, які гетеруються на дислокаціях, може змінювати величину інтенсивності та вигляд спектру дислокаційної люмінесценції (ДЛ). Зроблено аналітичний огляд результатів досліджень приповерхневого шару кремнію, структури, властивостей та визначено його роль у процесах еволюції дефектів і у формуванні випромінювальних центрів включень.

У **другому розділі** описується методика отримання експериментальних зразків та методи їх дослідження. Для досліджень використовували вирощені методом Чохральского монокристали *p*-Si леговані бором (КДБ-24). Описано процеси пластичної деформації [30] і високотемпературного відпалу в атмосфері

проточного кисню кристалів *p*-Si, а також методику нанесення металевих контактів, яка є запатентованою [28, 31]. Представлено методику отримання та аналізу спектрів електролюмінесценції світловипромінюючих структур (СВС), виготовлених на основі кремнію *p*-типу з високою концентрацією дислокацій. Детально розглянуто метод ємнісно-модуляційної спектроскопії глибоких рівнів, за допомогою якого досліджено спектральний розподіл та кінетичні параметри глибоких рівнів. Розроблено зондовий пристрій для вимірювання ємнісно-модуляційних спектрів одночасно на декількох діодах типу Шоттки, що сформовані на одному кристалі [29]. Методами інфрачервоної спектроскопії коливних рівнів та розрахунку, з вольт-фарадних характеристик, густини поверхневих станів проведено дослідження електрофізичних характеристик генетичних, генерованих в процесі обробки і адсорбованих дефектів чи дефектно-домішкових комплексів. Також представлено комп'ютерні програми, які будувались на основі розробленої теоретичної моделі, що представлена в п'ятому розділі дисертаційної роботи. Дана модель використовується для пояснення механізмів перебудови дефектної структури приповерхневих шарів кристалів кремнію.

У **третьому розділі** представлено результати дослідження та зроблено аналіз випромінювальних характеристик світловипромінювальних структур на основі *p*-Si. Показано зміни спектрів електролюмінесценції зі зміною амплітуди струму збудження та його напрямку пропускання, концентрації дислокацій, часу високотемпературного відпалу в атмосфері проточного кисню, величини зовнішньої пружної деформації та температури, при якій проводились дослідження. Відзначається, що спектри електролюмінесценції таких структур характеризуються наявністю максимумів дислокаційної люмінесценції в області інфрачервоних довжин хвиль випромінювання (1.1 – 1.55 мкм).

Показано, що ДЛ починає проявлятись за концентрацій дислокацій $\geq 10^5$ см$^{-2}$ (рис.1.а), а за умов подальшої пластичної деформації інтенсивність максимумів D1-D4 дислокаційної електролюмінесценції (ДЕЛ) та власної електролюмінесценції (ВЕЛ) виходить на насичення за концентрації $N_d \sim 10^7$ - 10^8 см$^{-2}$ (рис.1.б).

Це зумовлено тим, що з метою досягнення всезростаючої концентрації дислокацій температура і тривалість пластичної деформації зростали. У випадку збільшення температури пластичної деформації до $T > 1000$ К, внаслідок інтенсивної дифузії металів в кремнії, спостерігається висока концентрація останніх з подальшим утворенням силіцидів металів. Значна концентрація останніх та їх преципітація в околі ядра дислокації призводять до утворення каналів безвипромінювальної рекомбінації.

Зміна спектрів ДЕЛ при зміні амплітуди імпульсного струму збудження та його напрямку (рис. 2.а) вказує на перебудову електрично-активних дефектів в приповерхневому шарі кристалів кремнію. Така перебудова проявляється у збагаченні чи збідненні приповерхневої області рекомбінаційними центрами під алюмінієвим контактом типу «сітка».

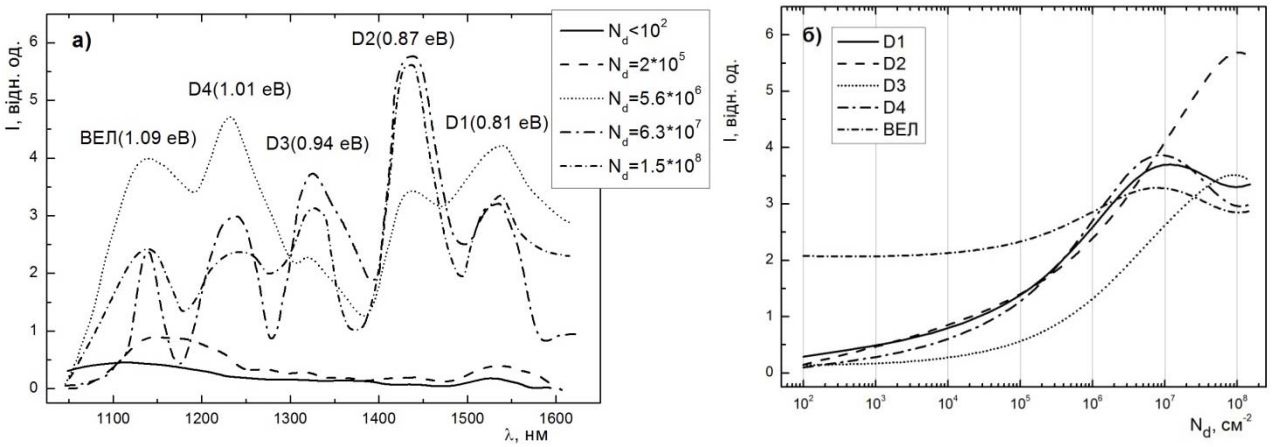

Рис. 1. а) – Спектр ЕЛ зразків з різною концентрацією дислокацій на поверхні (111) кристалів кремнію *p*-типу; б) – зміна величини максимумів (D1-D4 та ВЕЛ) зі зміною концентрації дислокацій

Показано, що проведений високотемпературний відпал в атмосфері проточного кисню зумовлює генерацію центрів рекомбінації (рис. 2.б). З аналізу результатів дослідження процес відпалу можна розділити на дві стадії: перша – тривалістю до 1 год., супроводжується інтенсивним утворенням безвипромінювальних центрів рекомбінації; друга – при часах відпалу > 1 год. відзначається переважаючою генерацією випромінювальних центрів.

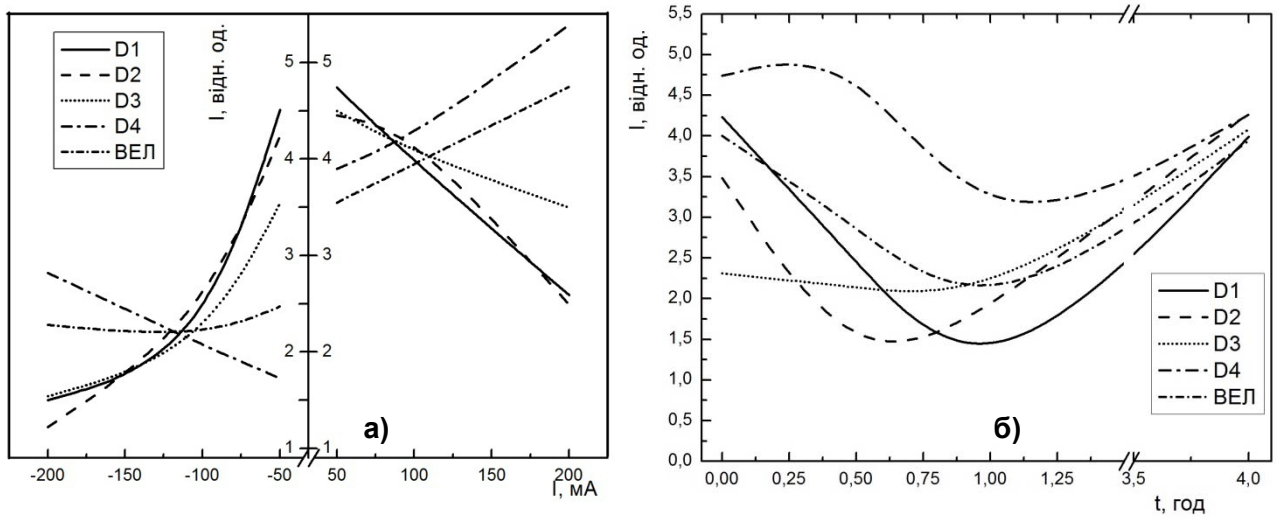

Рис. 2. Зміна величини інтенсивності максимумів (D1-D4 та ВЕЛ) зразків підданих пластичній деформації ($N_d \sim 10^7$ см$^{-2}$), зі зміною: а) – амплітуди та напрямку імпульсного струму (частотою 1кГц); б) – тривалості високотемпературного відпалу в атмосфері проточного кисню

Встановлено, що високотемпературний відпал в атмосфері проточного кисню супроводжується декількома механізмами впливу на ІЧ електролюмінесценцію зразків кремнію. Перший механізм – додаткове (в порівнянні з $N_d \leq 10^8$ см$^{-2}$після пластичної деформації) зростання концентрації дислокацій ($N_d > 10^8$ см$^{-2}$) в приповерхневому шарі. Другий – це перебудова

дефектної підсистеми зі зростанням концентрації, як випромінювальних, так і безвипромінювальних центрів рекомбінації в приповерхневому шарі кристалів кремнію. Також показано, що даний тип обробки кристалів p-Si покращує температурну стабільність центрів дислокаційної люмінесценції (рис. 3.а, б).

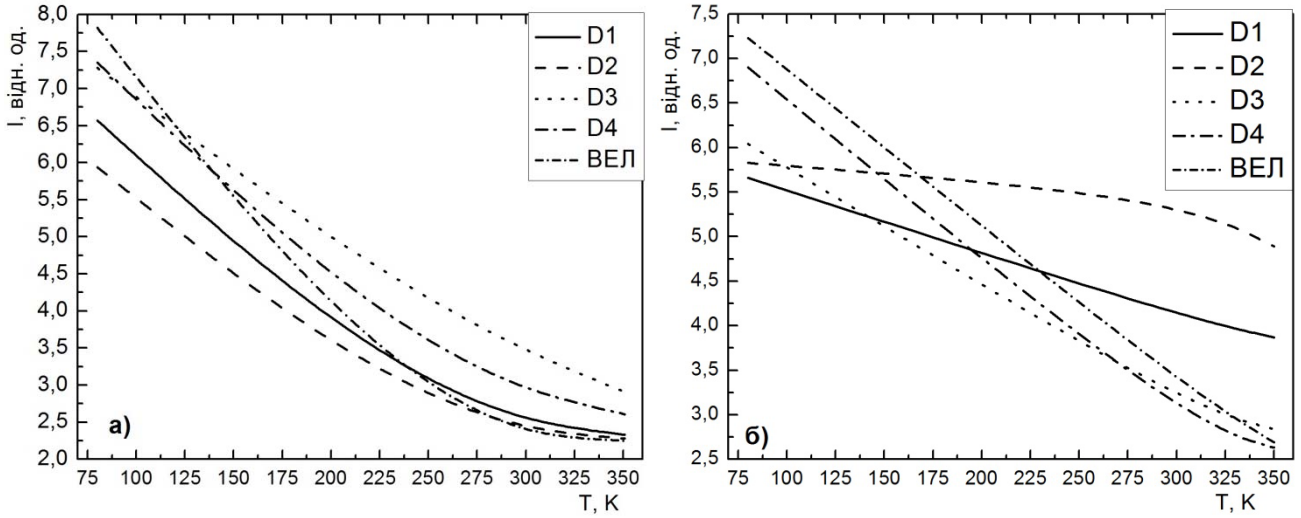

Рис. 3. Зміна величини інтенсивності максимумів ДЕЛ (D1-D4 та ВЕЛ) СВС ($N_d \sim 10^7$ см$^{-2}$) з температурою зразків, а) – що не піддавались високотемпературному відпалу в атмосфері кисню; б) зразки додатково відпалені за температури 1000 ^{o}C в проточній атмосфері кисню тривалістю 1 година

Показано (рис. 4.а), що пружне, зовнішнє механічне навантаження зразка, викликає ріст як інтегральної інтенсивності, так і значень максимальних інтенсивностей D1-D4 та ВЕЛ максимумів. Крім цього при збільшенні сили одновісного тиску на зразок додатково спостерігається збільшення півширини смуг ЕЛ (рис. 4.б).

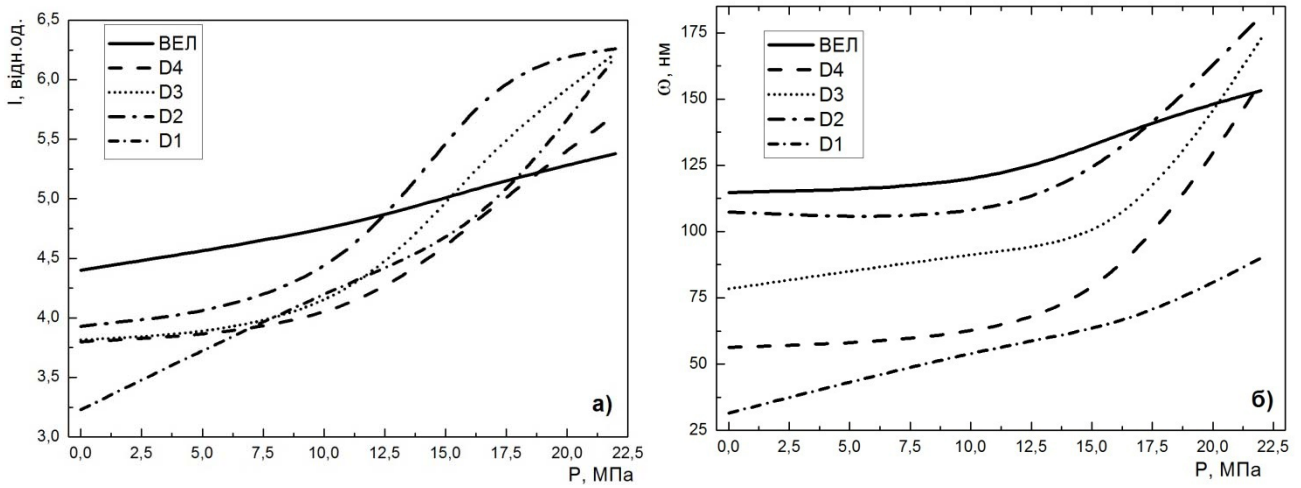

Рис. 4. Зміна максимального значення інтенсивності смуг D1-D4 та ВЕЛ (а), а також їх півширини (б) в залежності від пружного тиску. Зразки піддавали пластичній деформації з отриманням концентрації дислокацій на поверхні (111) $N_d \sim 10^7$ см$^{-2}$

Як випливає з експериментальних результатів (рис. 4.а), зміна інтенсивності максимуму власної ЕЛ за дії пружної деформації мінімальна. Для значень тисків від 0 до 22 МПа інтенсивність даного типу люмінесценції змінюється на 1% від рівня I_o. У той час, як для смуг D2 - D4 збільшення максимального значення інтенсивностей починається зі значень тиску в 10 МПа. Одночасно зі збільшенням інтенсивності максимумів, збільшується і їх півширина (рис. 4.б) $\Delta\lambda_{(D2)}$=77 нм, $\Delta\lambda_{(D3)}$=96 нм, $\Delta\lambda_{(D4)}$=102 нм.

Окремо слід відзначити, що для смуги D1 характерна практично лінійна залежність величини інтенсивності від величини пружної деформації стиску. На відміну від D2-D4 півширина смуги D1, як видно з рис. 4.б, зазнає менших змін $\Delta\lambda_{(D2)}$=50 нм.

Проаналізовано зміну коефіцієнту енергетичного виходу люмінесценції та проведено його порівняльний аналіз зі зміною спектральних залежностей. На основі цього аналізу показано підвищення випромінювальної ефективності СВС на основі *p*-Si у випадку пружної деформації.

У **четвертому розділі** представлено результати дослідження структурних дефектів з глибокими енергетичними рівнями у забороненій зоні кремнію за допомогою ємнісно-модуляційної спектроскопії та описано їх перебудову під дією високотемпературного відпалу, а також пружної зовнішньої та локальної внутрішньої деформацій.

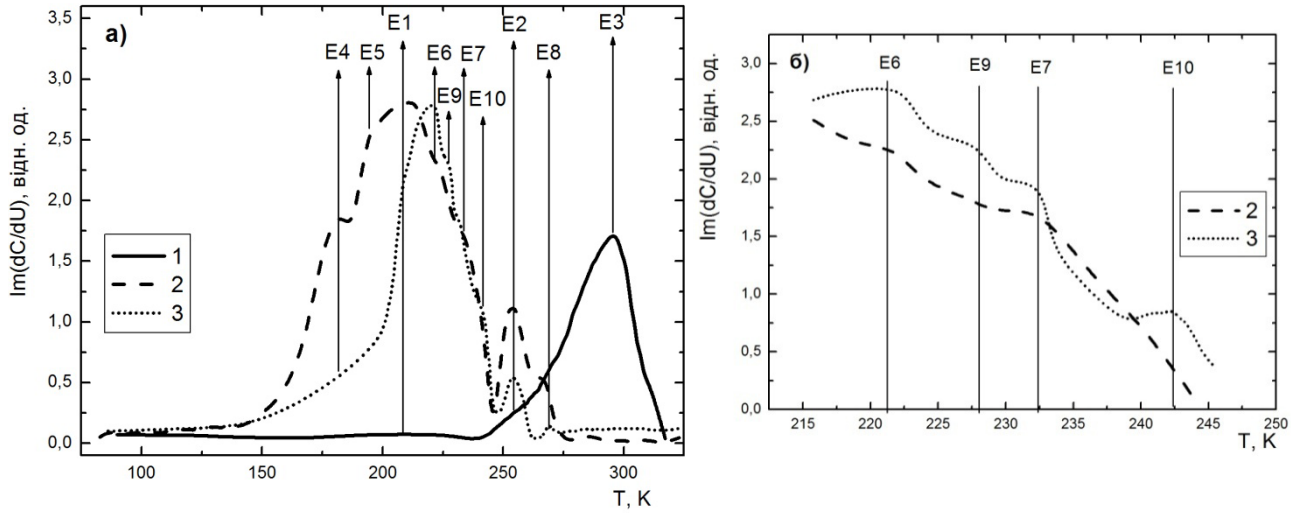

Рис. 5. Ємнісно-модуляційний спектр структури Al-Si-Bi (рис. 5.а): крива 1 – вихідний зразок *p*-Si; крива 2 – зразок після пластичної деформації ($N_d \approx 10^7$ см$^{-2}$); крива 3 – зразок додатково підданий відпалу в атмосфері проточного кисню, за температури 1000 ^{o}C, тривалістю 1 год. Збільшена ділянка спектру для діапазону температур від 210 К до 250 К (рис. 5.б)

Дослідження глибоких рівнів (рис. 5) в забороненій зоні приповерхневих шарів *p*-Si дало нам можливість встановити наявність великої кількості електрично-активних дефектів (Табл. 1).

Глибокі рівні Е1, Е2 та Е3 є типовими для бездислокаційних зразків кремнію р-типу. Аналіз отриманих результатів та літературних джерел [10] дозволяє стверджувати, що пластична деформація кристалів кремнію викликає появу нових дефектно-домішкових комплексів, пов'язаних з дислокаціями (Е4 - Е8). З отриманих результатів вимірювань видно, що високотемпературний відпал деформованого кристалу в атмосфері проточного кисню призводить до стрімкого зменшення амплітуди сигналів, які відповідають енергетичним рівням: Е1, Е2, Е4, Е5, Е8. Одночасно з цим має місце і збільшення амплітуди сигналів, які відповідають рівням: Е6, Е9 та Е10. Окремо відзначено, що глибокий рівень Е3 за дії пластичної деформації руйнується, а повторний високотемпературний відпал супроводжується його перебудовою за реакцією Уоткінса, чим і пояснюється підвищена концентрація комплексів C_I – O_I (максимум Е9, крива 3).

Таблиця. 1

Дефекти та енергія, що їм відповідає, отримані з ємнісно-модуляційного спектру зразків *p*-Si

Позначення	Енергія рівня, еВ	Тип дефекту		Позначення	Енергія рівня, еВ	Тип дефекту
Е1	Ev + 0.14	Дислокація – V		Е6	Ev + 0.23	дислокація – Si_I
Е2	Ec – 0.45	комплекс Fe – O		Е7	Ev + 0.26	дислокація – O
Е3	Ev + 0.18	комплекс C_S - O_I		Е8	Ec – 0.15	V – O
Е4	Ev + 0.04	V		Е9	Ev + 0,31	C_I – O_I
Е5	Ec - 0.08	60^o дислокація		Е10	Ev + 0,4	Si_I – Si_I

Представлено результати додаткових досліджень методами розрахунку густини поверхневих станів (рис. 6) та ІЧ спектроскопії коливних рівнів (рис. 7) для кристалів кремнію, що піддавались пластичній деформації та високотемпературному відпалу.

Розрахунок густини поверхневих станів (ПС) (рис. 6) показав квазімонотонний і неперервний характер зміни по всій ширині забороненої зони (крива 1). Для дислокаційного кремнію ($N_d \approx 10^7$ см$^{-2}$) особливим є наявність локальних максимумів в спектрі, що може бути зумовлене виходом дислокацій на поверхню та локалізацією на них дефектів з різною енергією іонізації. Додатковий відпал кремнію в атмосфері проточного кисню (крива 3) спричиняє незначну зміну густини ПС, що випливає зі зміни площі під кривими 2 та 3 ($S_2 = 3{,}85$ см$^{-2}$, $S_3 = 4{,}2$ см$^{-2}$). Це свідчить про температурний перерозподіл кисневих дефектів та атомів на поверхні, а також про десорбцію молекул води з поверхні.

Дослідження ІЧ спектрів поглинання показали наявність кількох груп максимумів в областях 1050-1200, 1250-1720, 2130-2150, 2370-2400, 2840-3300, 3650-3800 см$^{-1}$. Їх інтерпретація вказує на сукупність водневих, кисневих та вуглецевих комплексів, а також зв'язків цих атомів з атомами кремнію. В процесі пластичної деформації та відпалу відбувається перерозподіл в цих

спектрах, що є підтвердженням розриву зв'язків, процесів адсорбції та десорбції атомів і молекул кисню та водню з поверхні і, отже, зміни ПС.

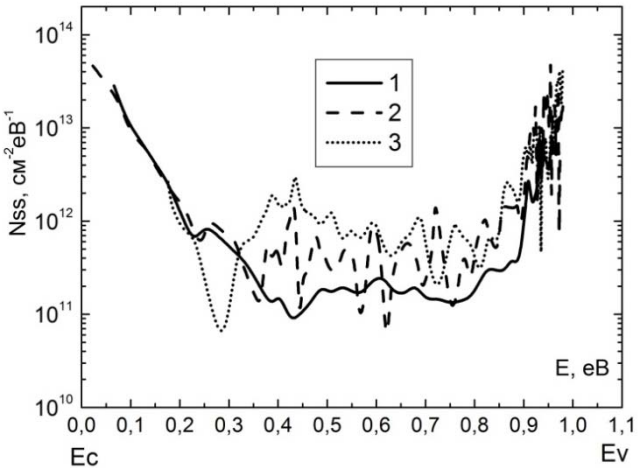

Рис. 6. Спектр поверхневих станів для трьох зразків *p*-Si підданих різному типу обробки: крива 1 – вихідний зразок *p*-Si; крива 2 – зразок після пластичної деформації ($N_d \approx 10^7$ см$^{-2}$); крива 3 – зразок додатково підданий відпалу в атмосфері проточного кисню, за температури 1000 °С, тривалістю 1 год.

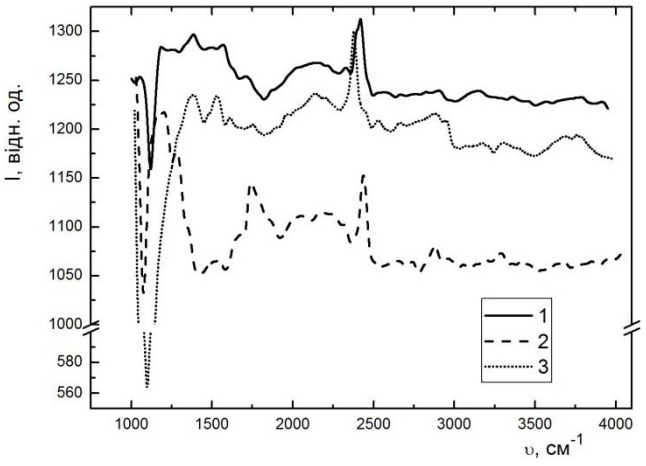

Рис. 7. ІЧ спектри коливних рівнів атомів та молекул в кристалах кремнію р-типу, що піддавались різним типам обробки.. крива 1 – вихідний зразок *p*-Si; крива 2 – зразок після пластичної деформації ($N_d \approx 10^7$ см$^{-2}$) крива 3 – зразок підданий відпалу в атмосфері кисню, Т=1000 °С, тривалістю 1 год.

Запропоновано модель енергетичної структури дефектів та їх комплексів в забороненій зоні кремнію, а також на основі цієї моделі побудований механізм випромінювальної та безвипромінювальної рекомбінації носіїв заряду в СВС на основі кремнію з високою концентрацією дислокацій.

Аналіз процесів перебудови структурних дефектів з використанням методики МЄСГР та спектральних залежностей дозволив показати, що енергетичні рівні $E_v + 0.08$ еВ (60^o дислокації), $E_v + 0.14$ еВ (дислокація – V), $E_v + 0.23$ еВ (дислокація – Si_I), $E_v + 0.26$ еВ (дислокація – O) відповідають дислокаційним центрам люмінесценції.

Показано, що деформаційні процеси у приповерхневому шарі кристалів *p*-Si супроводжуються дифузією точкових атомів з об'єму до поверхні та формування кисневмісних та водневовмісних комплексів за участю дислокацій.

П'ятий розділ присвячений теоретичному та комп'ютерному моделюванню процесів перебудови приповерхневих дефектів, викликаних наявністю локальної деформації поверхні кремнію, що виникла в результаті невідповідності параметрів ґратки матриці та плівки металу. Дане моделювання базується на зміні енергії взаємодії приповерхневого локально деформованого шару кремнію та дислокацій з точковими дефектами.

Загальна енергія гетероструктури:

$$W = \frac{1}{2}\int \sum \tau_i (\varepsilon_{kj})_i \, dV \,, \qquad (1)$$

де τ_i – величина механічного напруження в і-му кристалічному шарі з постійною ґратки a_i і товщиною h_i, $(\varepsilon_{kj})_i$ – тензор відносної деформації в і-му кристалічному шарі.

Ця енергія складається з трьох складових: енергії деформацій невідповідності, енергії взаємодії деформацій невідповідності і дислокацій, а також енергії дислокацій невідповідності. Якщо задано такі початкові умови утворення епітаксіального шару, при яких дислокації невідповідності не утворюються (температура підкладки ~ 350 °С, відсутність зовнішніх напружень), то загальна енергія визначається виразом:

$$W = \frac{\tau S h (2\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33})}{2x}, \qquad (2)$$

де S – площа напиленої плівки, h – товщина деформованого приповерхневого шару, x – положення координати направленої в глибину кристалу.

Краєві дислокації, що знаходилися в об’ємі кристалу до початку епітаксіального напилення, мають енергію, яка обчислюється за формулою:

$$W_d = \frac{NGb^2}{4\pi} \langle l \rangle \ln \frac{x}{r_0}, \qquad (3)$$

де N – концентрація дислокаційних виходів на поверхню кристалу кремнію, G – модуль зсуву, b – модуль вектора Бюргерса, $\langle l \rangle$ – середня довжина дислокацій, r_0 – радіус ядра дислокації.

За умови прикладання до кристала зовнішнього механічного навантаження енергія приповерхневого контактного шару змінюється на величину:

$$\Delta W = \pm \frac{F^2 L^2 h_2}{2 S_1^2 A E}, \qquad (4)$$

де F – сила, що прикладена до кристалу, L – вихідна довжина кристалу, S_1 – площа кристалу, до якої прикладається сила, E – модуль Юнга, A – коефіцієнт зміни модуля Юнга для приконтактного шару кремнію. Знак “+”, якщо зовнішня деформація і механічне поле під плівкою одночасно стискають або розтискають кристалічну ґратку. Якщо зовнішнє навантаження має протилежну дію до приповерхневого деформаційного поля, тоді знак “-”.

Дислокація в свою чергу може вигинатись та переміщуватись у напрямку, що перпендикулярний до напрямку дії зовнішнього навантаження. Також при цьому змінюється концентрація дислокаційних виходів на поверхню (N см$^{-2}$) і відповідно загальна енергія дислокацій в приповерхневій області кристалу.

Використання даної методики розрахунку енергії взаємодії у деформованому шарі кремнію дозволило отримати розрахункові залежності, які показані на рис. 8.

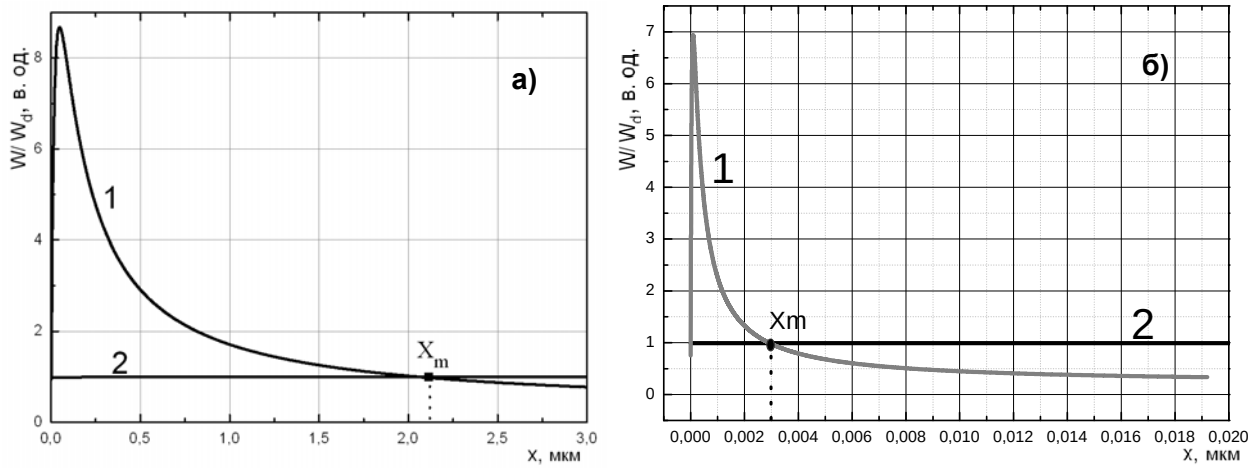

Рис. 8. Залежність сумарної енергії деформованих шарів Al (а) / Bi (б) та Si (крива 1) та енергії дислокацій (крива 2) як функція відстані від поверхні кристалу

Експериментально підтверджено дану модель за допомогою оптичної, атомно-силової мікроскопії. Методом контрольованого, пошарового зтравлювання поверхні (111) кремнію та її селективного травлення встановлено глибину, на якій спостерігається максимум концентрації дефектів, винесених з об'єму кристалу до його поверхні дислокаціями. На даній поверхні кристалів кремнію чітко видно високу концентрацію груп точкових дефектів та чітку межу розділу між поверхнею, що знаходилась під дією локальної деформації, викликаної плівкою алюмінію та вільною поверхнею.

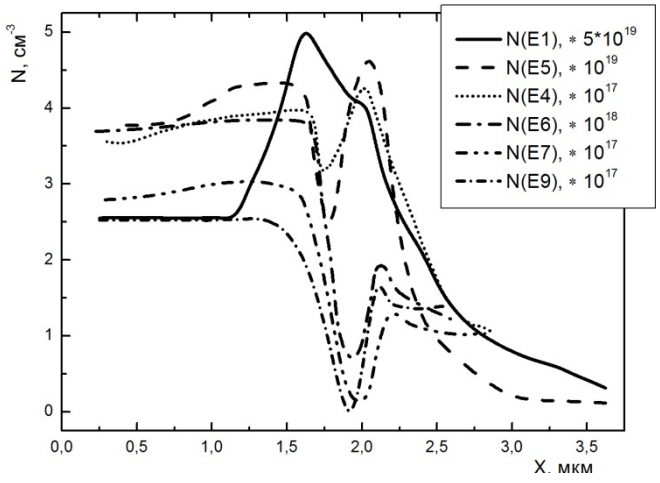

Рис. 9. Профілі розподілу, в залежності від координати, напрямленої вглибину зразка, концентрацій домішок в кремнію (N_d=10^7 см$^{-2}$), що піддавався високотемпературному відпалу в АПК тривалістю 1 год., після зняття плівки алюмінію та утворення ПБС Bi-Si-Al

Також приведено результати концентраційних розподілів дефектів у приповерхневому шарі кристалів кремнію (рис. 9), з яких чітко видно наявність максимуму в околі глибини 1.7 мкм від поверхні зразка, що в межах похибки 5% співпадає з проведеним моделюванням.

Показана зміна зонної структури кремнію при введенні дислокацій та за дії пружного зовнішнього механічного

навантаження. Результати, що приведені на рис. 10, дали можливість пояснити зміну інтенсивності та вигляду спектру електролюмінесценції. Дане моделювання вказує на те, що наявність дислокацій в кристалі кремнію змінює його зонну структуру. Так, в напрямку [111] в околі стелі валентної зони відщеплюється мілкий рівень. Інший рівень, пов'язаний з дислокацією, утворюється нижче дна зони провідності і показує складну поведінку зі зміною хвильового вектора. Додатково необхідно відмітити, що чистий кремній є непрямозонним напівпровідником, а за наявності дислокацій в структурі кристалів Si непрямозонність структур на основі кремнію суттєво зменшується. Таке зменшення викликає ріст ймовірності випромінювальних переходів у кремнієвих структурах з високою концентрацією дислокацій.

Ріст півширини смуг дислокаційної люмінесценції за дії пружного механічного навантаження пояснюється тим, що в результаті анізотропної деформації змінюється структура валентної зони *p*-Si, як зображено на рис. 11. Як результат отримуємо два енергетичних рівні, що відповідають легким та важким діркам. Цей факт також підтверджується проведеним моделюванням в результаті якого отримано, що розщеплення енергетичних рівнів 1 та 2 (рис. 11) становить $\Delta E \approx 0{,}02$ еВ (при максимальній пружній деформації). Дана зміна енергетичної структури впливає на спектри ДЕЛ, відповідно збільшуючи півширину спектральних смуг.

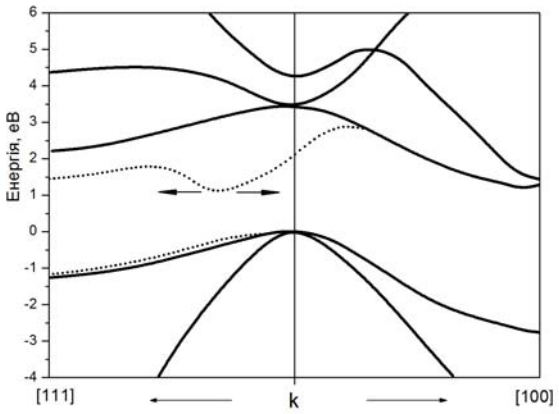

Рис. 10. Зонна структура кремнію з дислокаціями, отримана з комп'ютерного моделювання в програмі ABINIT v7.10

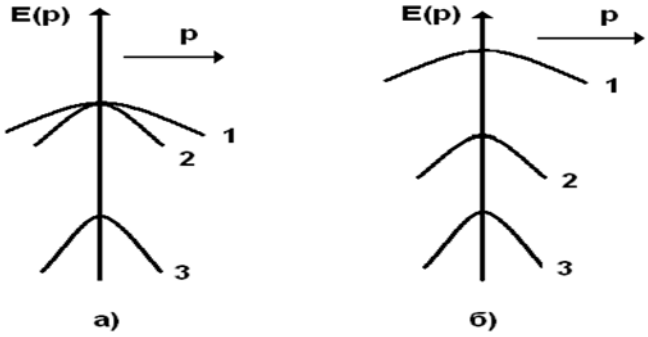

Рис. 11. Структура валентної зони недеформованого (а) та анізотропно деформованого p-Si. 1 – Енергія легких дірок; 2 – енергія важких дірок; 3 – вітка, зумовлена спін-орбітальною взаємодією

Другий висновок, на який вказує проведене моделювання, це те, що в результаті пружної деформації зразків кремнію з дислокаціями мінімум підзони у верхній половині забороненої зони, що викликана наявністю дислокацій, зміщується в одному чи у протилежному напрямку (рис. 10) залежно від типу деформації (стиск або розтяг).

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

1. Розроблена методика, яка дозволяє створювати стабільні світловипромінюючі ($\lambda = 1{,}1 – 1{,}6$ мкм) структури на основі *p*-Si з високою концентрацією дислокацій ($N_d \sim 10^9$ см$^{-2}$).
2. Введення методом високотемпературної дифузії атомів кисню в приповерхневий шар кристалу кремнію супроводжується утворенням та підвищенням концентрації киснево-дислокаційних комплексів та термодонорів. Встановлено, що дані дефектні комплекси відповідальні за D1 смугу ($\lambda = 1{,}54$ мкм) в спектрі електролюмінесценції.
3. Пропускання імпульсного струму збудження в прямому та зворотному напрямках супроводжується збагаченням чи збідненням дефектами приповерхневої області кристалу під алюмінієвим контактом типу «сітка», що приводить до зростання («сітка» заряджена позитивно) чи спадання, в 1,5 рази, («сітка» заряджена негативно) величини інтенсивності максимумів. Високотемпературний відпал кремнієвих СВС ($T \geq 1300$ К), тривалістю більше 1 год., підвищує температурну стабільність центрів люмінесценції.
4. Показано, що дефекти з енергіями $E_v + 0.08$ еВ (60^o дислокації), $E_v + 0.14$ еВ (дислокація – V), $E_v + 0.23$ еВ (дислокація - Si_I), $E_v + 0.26$ еВ (дислокація - O) відповідають дислокаційним центрам люмінесценції. Запропоновано модель відповідних енергетичних рівнів в забороненій зоні кремнію.
5. Встановлено, що одновісне механічне навантаження (в області пружної деформації) збільшує інтенсивність максимумів ДЕЛ, особливо смуги D1 (λ=1.54 мкм). Остання за дії пружної деформації зазнає крім зростання інтенсивності максимуму також і мінімального, порівняно з смугами D3-D4, зростання її півширини. Енергетична ефективність випромінювачів на основі *p*-Si в результаті зростає у два рази відносно початкової і становить 1,2%.
6. Запропонований механізм, який пояснює зміну спектру ЕЛ за дії пружного навантаження. Він базується на тому, що зміна положення мінімуму енергетичного рівня, що відповідає дислокаційно-домішковим комплексам, в координатах хвильового вектора впливає на інтенсивність випромінювання ДЛ, а також розщеплення відповідних енергетичних рівнів зумовлює зростання півширини смуг дислокаційної люмінесценції.
7. Експериментально отримані значення максимальної глибини захоплення дефектів (1,5 – 2 мкм) та їх концентраційні розподіли показують високу відповідність даним, що отримані в результаті проведеного моделювання.
8. Розроблена модель процесу захоплення дефектів приповерхневим шаром кристалу кремнію, що знаходиться під локальним навантаженням, викликаним різницями в параметрах ґратки матриці і металічної плівки. На основі цієї моделі розроблена комп’ютерна програма, що дозволяє визначати концентраційні розподіли та параметри максимальної глибини захоплення дефектів з об’єму кристалу, залежно від умов напилення металічної плівки на поверхню та від вихідних параметрів зразків Si.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Візуалізація результатів взаємодії точкових дефектів з поверхнею кристалів p-Si / Б.В. Павлик, Р.І. Дідик, Й.А. Шикоряк, А.П. Штабалюк, М. О. Кушлик // ФХТТ. – 2010. – Т. 11, № 3. – С. 675 – 678.
2. Дідик Р. Особливості електропровідності опромінених та пружно-деформованих кристалів p-Si / Р. Дідик, Й. Шикоряк, М. Кушлик, І. Чегіль // Теоретична електротехніка. – 2010. – вип.61 – с.171-180
3. Дідик Р. Мікроскопічні дослідження дефектної структури приповерхневого шару кристалів p-Si / Р. Дідик, Й. Шикоряк, А. Штабалюк, М. Кушлик // Теоретична електротехніка. – 2010. – вип.61 – С.164-170.
4. Павлик Б. Електрофізичні характеристики приповерхневих шарів кристалів Si p-типу з напиленими плівками Al, підданих пружній деформації / Б. Павлик, М. Кушлик, Р. Дідик, Й. Шикоряк, Д. Слободзян, А. Грипа, Р. Лис, Б. Кулик // Електроніка та інформаційні технології. – 2011. – вип. 2. с.57–64
5. Павлик Б. В. Генерування дислокацій в напівпровідникових кристалах методом пластичної деформації / Б.В. Павлик, Р.І. Дідик, М.О. Кушлик // Електроніка та інформаційні технології. – 2012. – вип. 2. – с.27-32
6. Павлык Б. В. Совершенство поверхности кристаллов p-Si и радиационно-стимулированые изменения поверхностно-барьерных структур Bi-Si-Al / Павлык Б. В.,Кушлык М. О., Слободзян Д. П. и др. // ФТП. – 2012. – Т.48, Вып. 8. – с.1017-1021.
7. Павлик Б. В. Радіаційно-індуковані зміни характеристик поверхнево-бар'єрних структур Bi-Si-Al / Павлик Б.В., Кушлик М.О., Слободзян Д. П.// Сборник научных трудов SWorld. – Т.4. – В.4. – С. 83-90. – 2012.
8. Павлик Б. Особливості електрофізичних характеристик пружно деформованих монокристалів p-Si / Б. Павлик, Р. Дідик, Р. Лис, Д. Слободзян, А. Грипа, Й. Шикоряк, М. Кушлик, І. Чегіль // Електроніка та інформаційні технології. – 2013. – Вип.3. – с.54–61
9. Павлик Б. В. Електрофізичні характеристики приповерхневих шарів кристалів Si p-типу, з напиленими плівками Al, підданих пружній деформації. / Павлик Б.В., Кушлик М.О., Дідик Р.І., Шикоряк Й.А., Слободзян Д.П., Кулик Б.Я. // УФЖ. – 2013. – В. 58. – № 8. – с.742-747.
10. Павлик Б. В. Про природу центрів електролюмінесценції в пластично деформованих кристалах кремнію p-типу / Б.В. Павлик, М.О. Кушлик, Д.П. Слободзян // Журнал нано- та електронної фізики. – 2015. – Т.3, №3. – с. 03043-1 – 03041-5
11. Павлик Б. В. Особливості впливу Х-випромінювання та магнітного поля на електрофізичні характеристики бар'єрних структур на основі дислокаційного p-Si, призначеного для сонячної енергетики / Б.В. Павлик, Д.П. Слободзян, М.О. Кушлик //- Журнал нано- та електронної фізики. – 2015. – Т.3, №4. – с. 03043-1 – 03041-5.

12. Pavlyk B. Radiation-Stimulated Changes in the Characteristics of Surface-Barrier Al–Si–Bi Structures with Different Concentrations of Dislocations at the Crystal Surface/ Pavlyk B., Kushlyk M., Slobodzyan D., Matvijishyn I. // Acta Mechanica et Automatica. – 2016. – V.10, No4 (38). – p.281-292.
13. Кушлик М. О. Дослідження електрофізичних характеристик одновісно-деформованих кристалів кремнію / Кушлик М. О. // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА–2009: 20–22 травня 2009 р.: тези доповідей. – Львів, 2009. – С. А23.
14. Кушлик М. О. Особливості хімічного травлення поверхонь монокристалічного кремнію / М. О. Кушлик, Р. І. Дідик // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА-2011: 18-20 травня 2011 р.: тези доповідей. – Львів, 2011. – С. А18.
15. Кушлик М. О. Деякі особливості хімічного травлення поверхонь монокристалічного кремнію / М. О. Кушлик // V міжнародна науково-практична конференція студентів і аспірантів “Молода наука Волині: пріоритети та перспективи досліджень”, Україна, Луцьк, 10-11 травня 2011. – С. 152.
16. Кушлик М. О. Дослідження електрофізичних характеристик приповерхневих шарів кристалів Si р-типу, з плівками Al, підданих пружній деформації / М. О. Кушлик, Б. В. Павлик, Р. І. Дідик, Й. А. Шикоряк, Б. Я. Кулик // Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників «Лашкарьовські читання - 2012» з міжнародною участю. – Київ, 1-3 квітня 2012р. – С. 220
17. Павлык Б. Эволюция дефектов в поверхностно-барьерных структурах Bi-Si-Al/ Б. Павлык, Д. Слободзян, А. Грыпа, Р. Лыс, М. Кушлык, И. Шикоряк, Р. Дидык// IX Международная конференция VIII Школа молодых ученых и специалистов поактуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, наноразмерных структур и приборов на его основе. Россия, Санкт-Петербург, 9-13 июля 2012. – 2012. – С.199 «КРЕМНИЙ-2012»
18. Павлик Б. В. Електрофізичні характеристики приповерхневих шарів кристалів p-Si, з напиленими плівками металів Bi та Al / Павлик Б. В., Кушлик М.О., Дідик Р.І., Слободзян Д.П., Грипа А.С. // Міжнародна науково-практична інтернет-конференція «Сучасні проблеми та шляхи їх вирішення в науці, транспорті, виробництві та освіті 2012», 18 – 27 грудня 2012 р. http://www.sworld.com.ua.
19. Павлик Б. В. Радіаційно-індуковані зміни характеристик поверхнево-бар’єрних структур Bi-Si-Al / Павлик Б.В., Слободзян Д.П., Грипа А.С., Лис Р.М., Кушлик М.О., Шикоряк Й.А., Дідик Р.І.// Міжнародна науково-практична інтернет-конференція «Сучасні проблеми та шляхи їх вирішення в науці, транспорті, виробництві та освіті 2012», 18 – 27 грудня 2012 р. http://www.sworld.com.ua.

20. Кушлик М. Дослідження дефектного стану перехідного шару кремнію під плівкою алюмінію. / М. Кушлик, Ю. Щебель // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА-2013, Україна, Львів, 15-17 травня 2013. ─ С. А31
21. Pavlyk B. V. Research defective condition at the surface layers of p-Si with deposited film of metal Bi and Al / Pavlyk B.V., Kushlyk M.O., Didyk R.I., Slobodzyan D.P. // XIV Міжнародна конференція з фізики і технології тонких плівок і наноструктур, 20-25 травня, 2013 р., Івано-Франківськ, Україна. – с.414
22. Pavlyk B. V. Charges of electrophisical characteristics of barrier structures based on p-Si with different concentration of dislocations under field influence / B.V. Pavlyk, D.P. Slobodzyan, M.O. Kushlyk // VIII Міжнародна школа-конференція «Актуальні проблеми фізики напівпровідників»: 24—28 червня 2013 р.: тези доповідей. – Дрогобич, 2013. – С.
23. Кушлик М. Дислокаційна електролюмінесценція пластично деформованих та термічно відпалених кристалів Si(p). / Маркіян Кушлик, Юрій Щебель // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики Еврика-2014, Україна, Львів, 15 – 17 травня 2014 р. – с.77.
24. Павлик Б. В. Особливості електрофізичних характеристик структури Bi-Si з різною густиною дислокацій на поверхні напівпровідника / Б.В. Павлик, Д.П. Слободзян, М.О. Кушлик, Й.А. Шикоряк, Р.І. Дідик // Матеріали 7-ої Українсько-польської науково-практичної конференції «Електроніка та Інформаційні Технології (ЕлІТ-2015)», 27-30 серпня 2015 р., Львів-Чинадієво, Україна, С. 177-179.
25. Кушлик М. О. Вплив високотемпературного відпалу в атмосфері кисню на центри дислокаційної люмінесценції в кристалах p-Si / М. О. Кушлик, Б. В. Павлик // Збірник тез конференції молодих вчених з фізики напівпровідників «Лашкарьовські читання-2015» з міжнародною участю, Київ, 1-3 квітня 2015р.– С. 75
26. Kushlyk M. Influence of elastic deformation on dislocation-related electroluminescence of p-type silicon / M. Kushlyk // Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників «Лашкарьовські читання - 2016» з міжнародною участю. – Київ, 1-3 квітня 2016р. – С. 48-49.
27. Kushlyk M. O. Defect subsystem restructuring in p-Si samples subjected to plastic deformation and high-temperature annealing in an oxygen atmosphere / Kushlyk M. O., Pavlyk B. V., Slobodzyan D. P., Lys R. M. // IX international conference on topical problems of semiconductor physics. – Truskavets, 16-20 May 2016. – p.84-85
28. Павлик Б. В. Патент на МПК:корисну модель 47597 Україна, МПК: C23C 14/50 (2006.01), C23C 14/54 (2006.01), H01L 21/02 (2006.01). Пристрій для двостороннього нанесення покриттів у вакуумі/ Б. В. Павлик, Й. А. Шикоряк, Р. І. Дідик [та ін.]; заявник і власник Львівський

національний університет імені Івана Франка. – № u200909571; заявл. 18.09.2009; опубл. 10.02.2010, бюл. №3
29. Павлик Б. В. Патент на корисну модель 84570 Україна, МПК G01R 1/00. Зондовий пристрій для вимірювання електрофізичних характеристик напівпровідникових структур при різних температурах / Б. В. Павлик, Й. А. Шикоряк, М. О. Кушлик [та ін.]; заявник і власник Львівський національний університет імені Івана Франка. – № u201305090; заявл. 19.04.2013; опубл. 25.10.2013, бюл. № 20.
30. Павлик Б. В. Патент на корисну модель 86829 Україна, МПК: G01N 3/08 (2006.01), H01L 21/322 (2006.01). Пристрій для пластичної деформації напівпровідникових матеріалів/ Б. В. Павлик, Й. А. Шикоряк, М. О. Кушлик [та ін.]; заявник і власник Львівський національний університет імені Івана Франка. – № u201309259; заявл. 23.07.2013; опубл. 10.01.2014, бюл. №1
31. Павлик Б. В. Патент на корисну модель 103703 Україна, МПК: H01L 21/02. Спосіб контактного точкового мікрозварення/ Б. В. Павлик, Й. А. Шикоряк, М. О. Кушлик [та ін.]; заявник і власник Львівський національний університет імені Івана Франка. – № u201506378; заявл. 30.06.2015; опубл. 25.12.2015, бюл. № 24.

АНОТАЦІЯ

Кушлик М. О. Деформаційні процеси та дислокаційна електролюмінесценція в приповерхневих шарах кристалів *p*-Si. Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків. – Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, 2016.

Робота присвячена встановленню природи дислокаційної люмінесценції світловипромінюючих структур на основі *p*-Si, а також дослідженню перебудови дефектної підсистеми приповерхневого шару даних структур за дії локальної та зовнішньої пружних деформацій, пластичної деформації, та високотемпературного відпалу в атмосфері проточного кисню.

Представлено механізми виготовлення та обробки кристалів кремнію в результаті яких досягається висока випромінювальна ефективність світловипромінюючих структур.

Показано, що локальна деформація приповерхневого шару кремнію, яка утворюється в результаті невідповідності параметрів ґратки матриці та напиленої плівки, здатна гетерувати дефекти та домішки винесені з об’єму кристалу до поверхні дислокаціями. Такі дефекти в сукупності з дислокаціями утворюють складні комплекси, які, в свою чергу, можуть впливати на рекомбінаційні процеси у приповерхневому шарі напівпровідника.

Початкова стадія високотемпературного відпалу в атмосфері проточного кисню, тривалістю до 1 год., приводить до зростання концентрації безвипромінювальних центрів рекомбінації. Збільшення часу відпалу супроводжується перерозподілом між безвипромінювальними та випромінювальними переходами на користь останніх. Також даний тип обробки впливає на термостабільність центрів, що відповідальні за D1 та D2 смуги електролюмінесценції в діапазоні температур 77 – 350 К.

Встановлено склад та структуру дефектної підсистеми приповерхневого шару кристалів *p*-Si, на основі яких виготовлялись світловипромінюючі структури. На базі даних досліджень побудована рекомбінаційна модель для структур на основі кремнію з високою концентрацією дислокацій.

Продемонстровано підвищення випромінювальної ефективності методом пружної зовнішньої деформації. Проведено теоретичне та комп'ютерне моделювання процесів перебудови дефектної підсистеми в приповерхневому шарі кремнію та зміни зонної структури кремнію при високих концентраціях дислокацій і пружній деформації.

АННОТАЦИЯ

Кушлык М. О. Деформационные процессы и дислокационная электролюминесценция в приповерхностных слоях кристаллов *p*-Si. Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 - физика полупроводников и диэлектриков. – Львовский национальный университет имени Ивана Франко, Львов, 2016.

Работа посвящена установлению природы дислокационной люминесценции светоизлучающих структур на основе *p*-Si, а также исследованию перестройки дефектной подсистемы приповерхностного слоя этих структур при действии локальной и внешней упругих деформаций, пластической деформации, а также высокотемпературного отжига в атмосфере проточного кислорода.

Представлено механизмы изготовления и обработки кристаллов кремния вследствие которых достигается высокая излучательная эффективность светоизлучающих структур.

Показано, что локальная деформация приповерхностного слоя кремния, которая присутствует вследствие несоответствия параметров решетки матрицы и напиленной пленки метала, способна геттерировать дефекты и примеси с объема кристалла к поверхности при помощи дислокаций. Эти дефекты в совокупности с дислокациями создают сложные комплексы, которые в свою очередь могут влиять на рекомбинационные процессы в приповерхностном слое полупроводника.

Начальная стадия, продолжительностью до 1 часа, высокотемпературного отжига в атмосфере проточного кислорода приводит к росту концентрации

безызлучательных центров рекомбинации. Увеличение времени отжига сопровождается перераспределением между безызлучательными и излучательными переходами в пользу последних. Также данный тип обработки влияет на термостабильность центров ответственных за D1 и D2 полосы электролюминесценции в диапазоне температур 77 - 350 К.

Установлено состав и структуру дефектной подсистемы приповерхностного слоя кристаллов *p*-Si, на основе которых изготовлялись светоизлучающие структуры. На базе данных исследований построена рекомбинационная модель для структур на основе кремния с высокой концентрацией дислокаций.

Продемонстрировано повышение излучательной эффективности методом упругой внешней деформации. Проведено теоретическое и компьютерное моделирование процессов перестройки дефектной подсистемы в приповерхностном слое кремния и изменения зонной структуры кремния при высоких концентрациях дислокаций и упругой деформации.

ABSTRACT

Kushlyk M. O. Deformation processes and dislocation-related electroluminescence in the surface layers of *p*-Si crystals. Manuscript.

Thesis for a Candidate Degree in physics and mathematics, speciality 01.04.10 - physics of semiconductors and dielectrics. - Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, 2016.

The work devoted to the establishment of dislocation-related luminescence nature of light emitting structures based on *p*-Si. The paper presents research of defect subsystem restructuring in subsurface layer of these structures under the action of local and external elastic deformation, plastic deformation and high temperature annealing in the flow oxygen atmosphere.

The mechanism and process of manufacturing of silicon crystals which lead to high efficiency light-radiating structures are represented.

It is shown that the local deformation of the subsurface layer of silicon is capable to getter defects and impurities learned from volume to surface of crystal by dislocations. This type of deformation formed as a result of lattice parameter mismatch of matrix and the metal film materials. Such defects together with dislocations generate complex systems that may affect the recombination processes in the subsurface layer of the semiconductor.

The initial stage (up to 1 hr.) of high temperature annealing in the flow oxygen atmosphere leads to increasing of non-radiative recombination centers concentrations. Increasing the annealing time is accompanied by redistribution between non-radiative and radiative transitions in favor of the last. Also, this type of treatment affects to the thermal stability of the centers which are responsible for D1 and D2 electroluminescent band in the temperature range of 77 - 350 K.

The composition and structure of the defect subsystem of light emitting structures based on *p*-Si crystals are established. Recombination model for such

structures is based on these researches on silicon with a high concentration of dislocation.

Increasing of radiative efficiency by external elastic deformation was demonstrated. Theoretical and computer modeling processes of defect subsystem restructuring in the silicon surface layer were completed. It is also done modeling of changes in the band structure of silicon under the action of high concentrations of dislocations and elastic deformation.