



**T.C.
İSTANBUL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**



DOKTORA TEZİ

**YARI İLETKENLERDE KUSURLAR VE KUSUR
DİFÜZYONU**

Erdal ÇATAK

Fizik Anabilim Dalı

Yüksek Enerji ve Plazma Fiziği Programı

Danışman

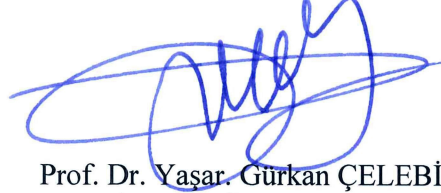
Prof. Dr. Y. Gürkan ÇELEBİ

Kasım, 2013

İSTANBUL

Bu çalışma 15/11/2013 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Fizik Anabilim Dalı Yüksek Enerji ve Plazma Fiziği Programı'nda Doktora Tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi:



Prof. Dr. Yaşar Gürkan ÇELEBİ
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi



Prof. Dr. Nurten ÖNCAN
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi



Prof. Dr. Yani SKARLATOS
Boğaziçi Üniversitesi
Fen Edebiyat Fakültesi



Prof. Dr. Sondan DURUKANOĞLU
FEYİZ
Sabancı Üniversitesi
Mühendislik ve Doğa Bilimleri
Fakültesi



Doç. Dr. Nevin KALKAN
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi

Bu alıřma, İstanbul Üniversitesi Bilimsel Arařtırma Projeleri Yürütücü Sekreterliđi'nin 24204 numaralı projesi ile desteklenmiřtir.

ÖNSÖZ

Doktora çalışmalarım boyunca her zaman beni destekleyen, bilgisini ve tecrübelerini paylaştan sevgili hocam Prof. Dr. Yaşar Gürkan ÇELEBİ'ye çok teşekkür ederim.

Laboratuvar çalışmalarında bana destek olan çalışma arkadaşlarım Ömer Göksel ERBAŞ, İbrahim TAŞ, Can BİNİCİ ve laboratuvarında veri toplama programlarını yazan Hüseyin UYSAL'a; ayrıca beni her zaman destekleyen arkadaşlarım Erdiñ Ulaş SAKA'ya, "hala bitiremedin" diye kızan Ferhat ÖZOK'a ve Alen OSANÇLIOL'a çok teşekkür ederim. Bu çalışmaya diferansiyel denklemleri nümerik çözerek büyük katkıda bulunan Oğuzhan KAŞIKÇI'ya ve tezimi iki kez okuyup, yazım hatalarımı düzeltmemi sağlayan Hüseyin ATCI ve Savaş BİROL'a, şükranlarımı sunarım.

Tüm eğitim ve öğretim yaşamım boyunca beni destekleyen başta ağabeyim Mehmet ÇATAK olmak üzere; kardeşim Süriye ÇATAK TEK ve ailemin tüm fertlerine teşekkürü büyük bir borç bilirim.

Son olarak; tanıdığım günden beri beni yalnız bırakmayan, sevgi ve desteğini esirgemeyen sevgili eşim Eylem ALMAZ ÇATAK'a gönülden şükranlarımı sunarım.

Kasım 2013

Erdal ÇATAK

İÇİNDEKİLER

Sayfa No

ÖNSÖZ.....	i
İÇİNDEKİLER	ii
ŞEKİL LİSTESİ.....	iv
TABLO LİSTESİ	vi
SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ	vii
ÖZET.....	ix
YARI İLETKENLERDE KUSURLAR VE KUSUR DİFÜZYONU	ix
SUMMARY	xi
IMPURITIES AND THEIR DIFFUSION IN SEMICONDUCTORS.....	XI
1. GİRİŞ.....	1
2. GENEL KISIMLAR	4
2.1. DEMİRİN SİLİKON İÇİNDE OLUŞTURDUĞU ELEKTRONİK SEVİYELER.....	4
2.2. SİLİKON İÇİNDEKİ DEMİRİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİ VE DİFÜZYONU	6
2.3. ARAYER DEMİRİN AKSEPTÖRLERLE YAPTIĞI ÇİFTLER	9
3. MALZEME VE YÖNTEM	13
3.1. GİRİŞ.....	13
3.2. İYON SÜRÜKLEME GEÇİŞ YÖNTEMİ (TID).....	15
3.3. İYON DİFÜZYON GEÇİŞ YÖNTEMİ (TIDIF).....	22
3.3.1. Teori.....	22
3.3.2. Diferansiyel Denklemlerin Nümerik Çözümleri.....	28
3.3.2.1. <i>Konsantrasyon-Derinlik Profili</i>	28
3.3.2.2. <i>Kapasite Geçişleri</i>	34
3.4. NUMUNE HAZIRLAMAK İÇİN KULLANILAN CİHAZLAR	46
3.5. NUMUNE HAZIRLAMA.....	47
3.6 DENEY DÜZENEGİ.....	49
4. BULGULAR	51
4.1. VERİLERİN TOPLANMASI VE ANALİZİ.....	51

5. TARTIŞMA VE SONUÇ.....	76
6. KAYNAKLAR.....	80
7. ÖZGEÇMİŞ.....	84

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa No

Şekil 3.1.1: Schottky diyoduna uyulanan gerilim pulsu.	14
Şekil 3.1.2: Schottky diyodunun gerilim pulsu altında kapasitesinin değişimi.	14
Şekil 3.2.1: p-tipi Schottky diyodunun deplasyon bölgesinin Şekil 3.1.1 ile tasvir edilen gerilim pulsu altındaki zamansal evrimi	17
Şekil 3.3 1: Toplam demir derinlik profili	29
Şekil 3.3.2: Toplam demir profilinin sıcaklıkla değişimi	31
Şekil 3.3.3: Demir konsantrasyon dağılımı-derinlik profilinin demir-boron çiftinin ayrışma sabitine bağlılığı.....	32
Şekil 3.3.4: Toplam demir konsantrasyonu dağılımı-derinlik profilinin uygulanan ters gerilime göre değişimi	33
Şekil 3.3.5: Kapasite geçişleri.	35
Şekil 3.3.6: TID zaman sabitinin (τ_d) sıcaklıkla değişimi	37
Şekil 3.3.7: TID ve TIDIF sinyallerinin demir-boron çifti ayrışma sabitine bağlılığı.....	39
Şekil 3.3.8: TID ve TIDIF sinyallerinin uygulanan ters gerilime bağlı olarak değişim	41
Şekil 3.3.9: TIDIF (τ_f) zaman sabitinin uygulanan ters gerilime göre değişimi	42
Şekil 3.5.1: Evaporatörün blok diyagramı.....	48
Şekil 3.6.1: Deney düzeneği şeması.	50
Şekil 4.1.1: Demir katkılanmış numune ve kontrol numunesinin konsantrasyon-derinlik profili	53
Şekil 4.1.2: Demir difüze edilmiş numunenin 225K'deki ve 433K'de tavlandıktan sonra 225K'deki konsantrasyon-derinlik profili.....	54
Şekil 4.1.3: Farklı sıcaklıklarda ham TID ve TIDIF verileri	56
Şekil 4.1.4: 080313diode12 adlı numuneye ait TID ve TIDIF verileri	58
Şekil 4.1.5: Kapasite geçişi-ters gerilim verileri.....	60
Şekil 4.1.6: Sabit sıcaklıkta maksimum kapasite değerinin uygulanan ters gerilimin mutlak değerine göre değişimi.....	62
Şekil 4.1.7: ΔC kapasite değişimi-ters gerilimin mutlak değeri değişimi	63
Şekil 4.1.8: Zaman sabiti-ters gerilimin mutlak değeri verileri	64
Şekil 4.1.9: TIDIF sinyallerine ait ΔC maksimum kapasite değişimleri-sıcaklık verileri	66
Şekil 4.1.10: Zaman sabiti-sıcaklık verileri.	68
Şekil 4.1.11: 080313diode5Su adlı numuneye ait zaman sabiti-sıcaklık verileri	69
Şekil 4.1.12: 080313diode5Su adlı numuneye ait TID piki.....	70

Şekil 4.1.13: TID zaman sabiti-sıcaklık verileri	71
Şekil 4.1.14: Kapasite derinlik hassasiyetine tekabül eden zaman sabiti.	72
Şekil 4.1.15: TID piki ve TIDIF piki	73
Şekil 4.1.16: Demir-boron çifti ayrışma sabitleri	74

TABLO LİSTESİ

Sayfa No

Tablo 2.1: <i>FeiBs</i> çiftlerinin simetrisi, yük durumları ve enerji seviyeleri.	10
Tablo 3.1: Demirin konsantrasyon dağılımını ve buna karşılık gelen kapasite geçişlerini hesap etmek için kullanılan parametreler.	29
Tablo 3.2: Şekil 3.3.3 çözümleri için parametreler.	32
Tablo 3.3: Şekil 3.3.4 çözümleri için parametreler.	33

SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ

Simgeler	Açıklama
Fe_i^+	: Pozitif yüklü arayer demir
Fe_i^0	: Nötr arayer demir
Fe_i^{++}	: İki kez iyonize olmuş arayer demir
B_s^-	: Yeralan (Yerine geçen) negatif boron
FeB	: Demir-boron çifti
E_T	: Tuzak enerjisi
E_V	: Valans bantı enerjisi
E_C	: İletkenlik bantı enerjisi
E_F	: Fermi enerjisi
E_b	: Bağlanma enerjisi
E_{diss}	: Demir-boron çiftlerinin ayrılma enerjisi
σ_p	: Deşik yakalama tesir kesiti
k_B	: Boltzmann sabiti
$D(Fe_i)$: Arayer demirin difüzyon katsayısı
D	: Difüzyon katsayısı
D_0	: Difüzyon katsayısı ön-üsteli
$N(FeB)$: Demir-boron çiftlerinin konsantrasyonu
$N(Fe_i^+)$: Pozitif arayer demirin konsantrasyonu
$N(B_s^-)$: Boron konsantrasyonu
N_i	: Silikon örgüsündeki arayer konumlarının konsantrasyonu
R_C	: Yakalama yarıçapı
q	: Elektronun yükü
p	: Deşik
ϵ	: Yarı-iletkenin di-elektrik sabiti
ϵ_0	: Boşluğun elektriksel geçirgenliği
N_A	: Akseptör konsantrasyonu
τ_{ass}	: Demir-boron (donor-akseptör) çiftlerinin bağlanma zaman sabiti
τ_{diss}	: Demir-boron çiftlerinin ayrılma zaman sabiti
ν	: Deneme frekansı

V_b	: Schottky diyotunun oluřum potansiyeli
V_r	: Ters gerilim
V_f	: Düzlenme gerilimi
C	: Kapasite
ΔC	: Kapasite deęiřimi
C_∞	: $t \rightarrow \infty$ zamanındaki kapasite deęeri
C_{max}	: Maksimum kapasite deęeri
C_0	: Minimum kapasite deęeri
v_d	: İyon sürüklenme hızı
W	: Deplasyon bölgesinin genişlięi
E	: Elektrik alan
E_M	: Maksimum elektrik alanı
μ	: Mobilite
τ_a	: Birikme zaman sabiti
τ_f	: Düzlenme zaman sabiti
N	: Hareketli pozitif katkıların konsantrasyonu
N_D	: Donor konsantrasyonu
ρ	: Uzay yükü yoğunluęu
ΔE	: Difüzyon enerji bariyeri
D_{eff}	: Efektif difüzyon katsayısı

ÖZET

DOKTORA TEZİ

YARI İLETKENLERDE KUSURLAR VE KUSUR DİFÜZYONU

Erdal ÇATAK

İstanbul Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Yaşar Gürkan ÇELEBİ

Kinetiği çok uzun yıllardır çeşitli gruplar tarafından çalışılmasına rağmen, pozitif yüklü demirin silikon içindeki difüzyon enerji bariyeri 0.49–0.94eV gibi geniş bir skalada yer almaktadır. p-tipi silikonda, demir pozitif yüklü arayer kusurları oluşturur. Silikona p-tipi özelliğini veren katkı elementleri negatif yük durumunda bulunduğu için, pozitif yüklü demir bu katkı atomlarıyla iyonik bağlar yapar. Dolayısıyla, demirin difüzyon parametrelerini belirlemeyi amaçlayan araştırmalarda, demir-akseptör ayrışma (dissociation) enerjisi belirleyici bir faktör olarak kendini gösterir. Literatürde demir-boron ayrışma enerjisi için üç çalışma bulunmaktadır, herbir çalışma ayrışma enerjisi için üç farklı değer önermektedirler: (1.05eV, 1.17eV, 1.4eV). Bu çalışmada, boron katkılı silikonda demir difüzyonu çalışılarak, demirin silikon içindeki difüzyon bariyeri ve demir-boron ayrışma enerjisi belirlendi. Çalışmada kullandığımız yöntem Schottky eklemesinin deplasyon bölgesinin belirli sürelerde dışarıdan uygulanan ters gerilimlerle modüle edilmesini temel alır. Silikon örgüsüne homojen dağılmış pozitif yüklü demir iyonları, ters gerilim uygulanmış Schottky eklemesinde, elektrik alanının etkisiyle deplasyon bölgesinin sınırına doğru sürüklenerek, eklemesinin kapasitesinde, sürüklenme hızına bağlı olarak, kapasite geçişlerine neden olur. Deplasyon bölgesinde demirin sürüklenme hızı aynı zamanda ortamın sıcaklığıyla da orantılıdır. Düşük sıcaklıklarda demirin sürüklenmesi yavaş, yüksek sıcaklıklarda daha hızlıdır. Dolayısıyla, sabit ters gerilim altında, Schottky eklemesinin kapasite değişim hızı da sıcaklığa bağlı olarak sürüklenen demirin difüzyonuyla orantılı olacaktır. Pozitif yüklü iyonların Schottky

eklemindeki bu davranışını karakterize eden model, literatürde TID (Transient Ion Drift) olarak bilinir.

Elektrik alan etkisiyle sürüklenen ve deplasyon bölgesinin sonuna doğru biriken pozitif demir iyonları, bu bölgede bir konsantrasyon gradyenti oluştururlar. Schottky eklemine dışarıdan uygulanan ters gerilim kaldırıldığında, demir iyonları geri difüze olup boşalttıkları bölgeyi doldurarak, yeterince uzun süre beklenildiğinde tekrar homojen bir dağılım oluşturacaklardır. Demir iyonlarının geri difüzyonu da, elektrik alan altında sürüklenmelerine benzer olarak, Schottky eklemının kapasitesinin, difüzyon hızına bağlı olarak değişmesine neden olur. Benzer şekilde kapasitenin değişim hızı, geri difüze olan demirin difüzyonuna bağlıdır. Burada da kapasite değişim hızları ortamın, sıcaklığına bağlı olarak tayin edildiğinde pozitif yüklü demirin difüzyon parametreleri belirlenebilir. Demirin Schottky ekleminde geri yayılımını tasvir eden modele biz TIDIF (Transient Ion Diffusion) olarak adlandıracağız.

Araştırmanın deneysel kısmını homojen olarak demir katkılandırılmış p-tipi silikon pullardan üretilen Schottky diyotlarının yukarıda TID ve TIDIF olarak adlandırdığımız modellerin uygulanabileceği fiziksel koşullara tabi tutulmasıyla gerçekleştirdik. Schottky eklemelerine belli sürelerde ters gerilim uygulanarak, demir iyonlarının belli sıcaklıklarda deplasyon bölgesinin sınırına sürüklenmesi ve ters gerilimin kaldırılmasıyla da bu iyonların gradyentinin doğurduğu kuvvetle geriye yayılımı sağlandı. Schottky eklemi kapasitesinin, ters gerilimin uygulandığı ve kaldırıldığı sürelerde zamana bağlı değişimini TID ve TIDIF yöntemleri çerçevesinde analiz ederek bu kapasite geçişlerinin hızlarını, yani zaman sabitlerini, farklı ortam sıcaklıklarının ve deneyin diğer parametrelerinin (uygulanan ters gerilim, bu gerilimin süresi, genliği vb.) fonksiyonu olarak belirleyip, pozitif yüklü demirin difüzyon bariyeri belirlendi.

TID ve TIDIF yöntemleri demir iyonlarının, sırasıyla, sadece sürüklenme ve sadece difüzyon süreçlerine tabi olduğunu varsayarak iki yaklaşıklık yapar. Deneyler süresince kapasite geçişlerinin davranışı, bu yaklaşıklıkların her sıcaklık bölgesinde uygun olmadığını gösterdiğinden, TID ve TIDIF yöntemlerinin yeniden gözden geçirilmesini zorunlu kıldı. Örneğin; demirin boronla yaptığı iyonik bağın kapasite geçişlerine etkisi, ne TID ne de TIDIF modellerinde hesaplara dahil edilmez. Buna ilave olarak, ters gerilim uygulanmış Schottky bariyerinde sürüklenen demirin TID yönteminin varsayımlarından biri deplasyon bölgesini terk etmediği varsayılır ki bu her sıcaklıkta gerçekleşen bir kabul değildir. Sonuç olarak, demirin silikon içindeki davranışını hem sürüklenir hem de difüze olurken “gerçeğe” daha uygun betimleyen bir model seçip, bu modelin analitik çözümleri olmadığından, deney şartlarına uygun nümerik çözümlerinden faydalanarak pozitif yüklü demirin boron katkılı p-tipi silikonda difüzyon bariyerini ve boron-demir ayrışma enerjisini belirledik.

Elde edilen sonuçlar, demirin borondan ayrışma enerjisinin 1.0eV civarında olduğuna, literatürde rapor edilen maksimum değerden (1.4eV) daha küçük olduğuna, işaret etmektedir. Elde ettiğimiz tüm sonuçları düşünerek, bu değeri bir alt limit olarak değerlendirmek daha doğru olacaktır. Difüzyon bariyeri için 0.6eV mertebesinde ortalama bir değere ulaşıldı. Daha önce rapor edilen değerlerle karşılaştırıldığında, bulduğumuz değer, yeni çalışmalarda bulunan değerlere daha uyumlu olduğu görülmektedir.

Kasım 2013, 84 Sayfa

Anahtar Kelimeler: Kusur, difüzyon, geçiş, TID, TIDIF

SUMMARY

Ph. D. THESIS

IMPURITIES AND THEIR DIFFUSION IN SEMICONDUCTORS

Erdal ÇATAK

İstanbul University

Graduate School of Science and Engineering

Physics Department

Supervisor: Prof. Dr. Yaşar Gürkan ÇELEBİ

Even though several groups have studied the dynamics of positively charged iron in p – type silicon over the years, its diffusion barrier is still on debate. Reported values lie between 0.45eV to 0.94eV. In p- type silicon, iron creates positively charged interstitial defects. Since p-type dopants in silicon are negatively charged, positively charged iron in silicon undergoes Coulombic interaction and forms ionic compounds with these atoms. Therefore dissociation energy of iron from acceptor atoms plays an important role in determining diffusion parameters of iron in silicon. There have been only three reports citing three different values on the iron’s dissociation energy (1.05eV, 1.17eV, 1.4eV).

In this work, diffusion and disassociation barrier of positively charged iron in boron doped silicon have been determined. The technique we used utilizes the Schottky barrier’s behavior under reverse bias externally applied with different amplitudes and durations. Under the influence of the electrical field provided by the reverse biased Schottky barrier, homogenously distributed iron ions will be drifted towards the end of the depletion region; thereby, depending upon the drift rate, causing a change – a transient – of the barrier’s capacitance. The drift rate of iron within the depletion region depends also on the temperature of the host lattice. At low temperatures, iron’s drift rate will be low, at higher temperatures will be relatively higher. As a result, under a constant reverse bias, the rate of change of the barrier’s capacitance will be proportional to the iron’s drift rate within the depletion region. The model describing the behavior of

positively charged atoms within the depletion region of a Schottky barrier is called Transient Ion Drift (TID) in scientific literature.

Under the influence of the electrical field, iron ions will be accumulated at the end of depletion region, creating a concentration gradient. When the reverse bias is removed, these ions will undergo a back diffusion process to reoccupy the depleted region. Given enough time the ions will reestablish the homogenous distribution they had before the reverse bias is applied. This back diffusion, similarly to their drift under the field, depending upon the rate of the diffusion processes will cause a transient on the capacitance of the Schottky barrier. Here as well, the rate of change of the capacitance when determined as a function of the host's temperature can be related to the iron's diffusion parameters. The model describing iron's back diffusion in Schottky barrier will be named here as Transient Ion Diffusion (TIDIF).

Experimental part of the investigation was realized by fabricating Schottky diodes on homogeneously iron doped p-type silicon wafers so that above named -TID and TIDIF-models can be applied. By reversely biasing Schottky diodes for definite durations, we have forced iron ions at different host temperatures to drift and accumulate near the end of the depletion region and by removing the bias we have provided the means for the accumulated ions to back diffuse due to the force created by their concentration gradient. Time dependence of the Schottky barrier's capacitance, while reverse bias was on and off, was analyzed in the frame work of TID and TIDIF models. This allowed us to determine the rate of capacitance change, that is their time constants, as a function of temperature and other parameters of the experiment (reverse bias amplitude, duration and such) thereby providing the means to determine both diffusion and dissociation barriers of positively charged iron in boron doped silicon.

As discussed at the appropriate times within this thesis, TID and TIDIF techniques assume only drift and only diffusion of the positively charged ions, respectively. Since the behavior of the capacitance transients during the experiments has shown that these approximations were not appropriate for the whole temperature range, TID and TIDIF techniques were required to be reconsidered. For example, the effect of the ionic bond iron makes with boron is not taken into account neither with TID nor with the TIDIF techniques. Another example would be the iron diffusing under the effect of applied reverse bias is assumed only to accumulate at the end of the depletion region. This approximation does not hold for all the temperatures and fields. At higher reverse biases and temperatures, drifting iron will also find time to diffuse out of the depletion region, causing an extra capacitance change that cannot be analyzed with the current models at hand. As a result, a better model describing both drift and diffusion of iron at the same time was chosen. Since the new model does not provide analytical solutions, numerical solutions with appropriately chosen parameters were used to estimate the diffusion and dissociation barriers of positively charged iron in boron doped p-type silicon.

November 2013, 84 Pages

Key Words: Defect, diffusion, transient, TID, TIDIF

1. GİRİŞ

Demir doğada en bol bulunan ve gerek günlük hayatta, gerekse teknoloji üretiminde en çok kullanılan geçiş elementlerinden biridir. Demirin teknolojideki sık kullanımı, üretimleri sırasında yarı-iletken aletlerin temelini oluşturan kristal yapılara ve üretilen yarı-iletken cihazlara bulaşmasını kaçınılmaz kılar [1]. Demir bulaştığı yarı-iletken cihazların performansını etkilemektedir. Geçiş elementleri yarı-iletken aygıtın bant aralığında derin seviyeler oluşturma, katkı atomları veya safsızlıklarla bağ oluşturmak suretiyle kompleksler yaratma, topaklanmalar oluşturma v.b. süreçlerle aygıtın çalışma düzenini etkilerler [2]. Yarı-metaller, özel olarak demir, yarı-iletkenin bant aralığında derin seviyeler yaratarak, yarı-iletken cihazın deplasyon bölgesinde ikincil taşıyıcıların yarı-ömrünü kısaltarak veya ikincil taşıyıcılar yaratarak, cihazın performansını etkiler [1]. Ayrıca kapı oksitlerde metallere karşılaşılması veya metallerin Si/SiO₂ arayüzlerinde birikmeleri yerel olarak oksit tabakasının incelmeye ve yüzeyin kabalığının artmasına neden olarak MOS (metal oksit yarı-iletken) cihazlarının verimini azaltır [2]. Yüksek sıcaklık süreçlerinde, yarı-metallerin büyük difüzyon katsayılarına sahip olmasından dolayı hızlı difüze olmaları cihazların büyük alanlarının kontamine olmasına sebep olur ve bunların çözünürlüğünün sıcaklığa keskin bir şekilde bağlı olması, soğutma süresince düşük konsantrasyonlarda dahi metallerin süper saturasyonuna neden olmakta, çökeltilerin, kusurların ve komplekslerin oluşmasını sağlamaktadır [1].

Silikon içinde çözülmüş demirin ve oluşturduğu komplekslerin neden olduğu oluşum ve yokoluşum merkezleri ters beslenmiş herhangi bir ekleme sızıntı (leakage) akımlarının artmasına neden olurlar. Böylece bu eklemlerde güç ihtiyacının artmasına ve ekleme fazla ısının açığa çıkmasına neden olurlar [2]. Kristal ve polikristal fotovoltalıklar ise demir kontaminasyonu ikincil taşıyıcı difüzyon uzunluğunun kısalmasına neden olan rekombinasyon merkezleri oluşturur [1].

Demirin yarı-iletken cihazlara bulaşmasını tamamen engelleme olanağı bulunmadığından, onun yarı-iletken cihazın performansını nasıl etkilediğini ve yarı-

iletken içindeki davranışını bilmek yaratacağı problemlerin çözülmesini sağlayabilir. Teknolojide kullanılan yarı-iletken cihazların boyutları küçüldükçe, demir gibi yarı-metallerin bu cihazlarda oluşturdukları kusurların cihazların performanslarını etkilemeleri kaçınılmaz olur. Kusurların etkilerini anlamak ve bunları en aza indirmenin yollarını bulmak, elektronik cihazların performansının artırılmasını ve kullanım sürelerinin uzatılmasını sağlayabilir. Ayrıca yarı-metallerin yarı-iletken cihazlarda meydana getirdiği kusurları anlamak, bu kusurlardan yararlanarak yeni özelliklere sahip aygıtlar tasarlamaya yarayabilir.

Bu çalışma çerçevesinde, yarı-iletken aygıtların yapımında en çok kullanılan malzemelerin hala başında gelen silikonda demirin difüzyonu incelenecek. Çalışma beş bölümden oluşmaktadır. Okumakta olduğunuz Birinci Bölüm'de çalışmanın içeriğine giriş yapılmaktadır. İkinci Bölüm'de literatürdeki çalışmalar derlenerek, demirin silikon içinde yaptığı kusurlar, bu kusurların enerji seviyelerine ait bilgiler ve demirin p-tipi silikonda katkı atomlarıyla yaptığı etkileşimler ile bu etkileşimlerin silikonun bant aralığında meydana getirdiği kusurlarla ilgili bilgiler anlatıldı. Ayrıca bu bölümde demirin silikon içindeki difüzyonu ile ilgili veriler, pozitif yüklü demirin akseptörlerle yaptığı çift reaksiyonları, demir-boron çiftlerinin bağlanma ve ayrışma mekanizmaları ile ilgili veriler ayrıntılı olarak tartışıldı.

Üçüncü Bölümde deney verilerinin değerlendirileceği modeller tartışıldı. Deneylerde p-tipi silikondan yapılan bir Schottky diyotunun ters gerilim altında ve bu ters gerilim kaldırıldığında, zamana bağlı kapasite ölçümleri yapıldı. Bu ölçümlerin değerlendirileceği modeller bu kısımda tartışıldı. Öncelikle ters beslenen Schottky eklemesinde elektrik alanın etkisi ile sürüklenebilecek pozitif yüklü demir iyonlarının davranışının modellendiği TID (Transient Ion Drift) yöntemi ve bu modele sonradan yapılan iyileştirmeler değerlendirildi. Daha sonra bu modelin bir türevi olan TIDIF (Transient Ion Diffusion) yöntemi ele alındı. Bu model, elektrik alanın etkisi ile Schottky eklemesinin arındırılmış (deplasyon/boşaltılmış) bölgesinin sınırına doğru sürüklenmiş olan demir iyonlarının, elektrik alanın kaldırılmasıyla geri difüzyonunu tasvir eder. Her iki modeli de tasvir eden diferansiyel denklemlerin nümerik çözümleri deney verileri ile karşılaştırıldı. Ayrıca bu bölümde deneylerde kullanılan Schottky diyotlarının fabrikasyonu ve deney düzeneği ayrıntılı olarak anlatıldı.

Dördüncü Bölüm'de yaptığımız deneyler anlatılarak, elde edilen veriler ayrıntılı olarak değerlendirildi. TID ve TIDIF modelleri çerçevesinde deney verilerinin analizleri yapılarak pozitif yüklü demirin p-tipi silikon içinde difüzyonunu tasvir eden parametreler elde edildi. Beşinci Bölüm'de deneylerde elde edilen sonuçlar Dördüncü Bölüm'de anlatılan modeller çerçevesinde tartışılarak değerlendirildi ve literatürdeki mevcut verilerle karşılaştırıldı.

2. GENEL KISIMLAR

2.1. DEMİRİN SİLİKON İÇİNDE OLUŞTURDUĞU ELEKTRONİK SEVİYELER

Demir silikon içinde genellikle arayer atomu olarak bulunur [1, 2, 3]. Arayer demir oda sıcaklığı ve üzerindeki sıcaklıklarda p-tipi silikon içinde pozitif yük durumunda ve hareketli olduğundan, ortamda bulunan negatif yüklü iyonlarla çift oluşturur. 370K ve üzerindeki sıcaklıklarda demirin negatif yüklü iyonlarla oluşturduğu çiftler ayrıştığından, demir hızlı bir şekilde difüze olur [2]. Demirin arayer örgü konumu Greulich-Weber ve diğ. [3] tarafından demirin silikon atomlarıyla süper-ince yapı etkileşimini ölçen elektron nükleer çift rezonans (electron nuclear double resonans (ENDOR)) yöntemi kullanılarak, etkin kütle teorisinin öngörülerıyla uyum içinde olduğu doğrulandı. Bu çalışmadan sonra, elektron paramagnetik rezonans (EPR) yöntemiyle demirin donör özellikleri ve yüksek difüzyon katsayısı Woodbury ve diğ. [4] tarafından çalışılmış, demirin arayer atomu olarak difüze olduğu doğrulanmıştır. Silikon içinde yer-değişimli (substitutional) demirin difüzyonunun varlığına işaret eden deneysel bir bulgu bulunmamaktadır [2]. Bununla birlikte, serbest spin yoğunluk fonksiyonel teorisi [5] ve lineer olmayan sanki-potansiyeller kullanan öz-uyumlu fonksiyonel yoğunluk modelleri ile elde edilen veriler [6], yer-değişimli demirin silikonun örgülerinde durağan olabileceğini, fakat bant aralığında herhangi bir elektriksel seviye yaratamayacağını gösterdi. Mössbauer spektroskopisi verilerinin analizi yukarıda bahsi geçen teorik çalışmaları destekler bilgiler vermiştir [2]. Mössbauer spektroskopisi ölçümleri yeterince yüksek demir konsantrasyonu sağlamak için iyon implantasyonu gerektirdiğinden, örgü atomları ile çarpışan demir atomlarından kaynaklanan yer değiştirme, yer-değişimli demirin kaynağı olarak kabul edilir. Dolayısıyla orta düzeyde katkılanmış silikonda ölçülebilir konsantrasyonda yer-değişimli demirin varlığını doğrulayacak uygun deneysel veri bulunmamaktadır [2].

İstemli ve istem dışı demir kontamine edilmiş örnekler üzerinde yapılan çalışmalar $E_T = E_V + (0.40 \mp 0.05)eV$ enerjisinin demire ait bir donör seviye olduğunu

göstermiştir [2, 3, 4]; E_V valans bandı sınırındadır. Bu seviye, tarihsel olarak ilk kez Collins ve Carlson [7] tarafından arayer demirin donör seviyesi olarak tespit edilmiştir. Daha sonraki yıllarda Feichtinger ve diğ. [8] farklı katkı konsantrasyonlarına sahip p ve n-tipi silikon örneklerine demir katkılayarak, bu seviyenin arayer demirin yük durumunun pozitiften (Fe_i^+) nötral (Fe_i^0) duruma geçmesiyle yayınlanandeşiklerin oluşturduğu seviyeye karşılık geldiğini ispatlamışlardır.

Hall olayı ve öz direnç ölçümleri arayer demirin p-tipi silikondadeşik konsantrasyonunda azalma ile sonuçlanan donör özelliklerini göstermiştir ve n-tipi silikonda serbest elektron yoğunluğunu etkileyecek yer-geçimli bir etki, yani herhangi bir alıcı seviye bulunmamıştır [6, 9].

Silikon içinde arayer demir, Fermi seviyesinin, $E_C - 0.45\text{eV}$ ve $E_V + 0.45\text{eV}$ enerji aralığına göre, konumuna bağlı olarak sadece Fe_i^0 ve Fe_i^+ yük durumlarında bulunur [2, 8]. E_C iletkenlik bandı sınırındadır. Bu Kısım 2.2’de tartışılacaktır.

Demir seviyelerinin (aynı zamanda demirin yük durumu) yasak enerji aralığındaki konumu sıcaklığa bağlıdır. Özellikle, yüksek sıcaklıklarda bu seviyelerin sıcaklığa kuvvetle bağlı olduğu demirin silikon içinde katkı seviyesine bağlı çözünürlük (solubility) verilerinin analizi ile gösterilmiştir [2, 10]. Nötron aktivasyon analizi ve Mössbauer spektroskopisi çalışmaları demirin donör seviyelerinin artan sıcaklıkla valans bandına doğru hareket ettiğini göstermiştir [10, 11]. Nötron aktivasyon analizi ve Mössbauer spektroskopisi çalışmaları ile $T=1073\text{K}$ sıcaklığında elde edilen demir seviyesinin konumu, DLTS (Deep Level Transient Spectroscopy: Derin Seviye Geçiş Spektroskopisi) ve Hall olayı ölçümleri ile bulunan demir seviyesi ile aynıdır. Fakat $T>1173\text{K}$ sıcaklıklarında demir seviyeleri valans bandına doğru düşerler ve $T>1373\text{K}$ sıcaklıklarında hemen hemen valans bandıyla çakışırlar [10, 11]. Düşük sıcaklıklarda DLTS ve Hall olayı verileri ve yüksek sıcaklıklarda demirin silikon içindeki çözünürlük verileri [6, 8, 9] olmasına rağmen, orta sıcaklıklarda (350K-700K) literatürde arayer demirin oluşturduğu kusurlarla ilgili veri bulunmamaktadır ve genellikle bu aralıktaki veriler, iki ucun ekstrapolasyonu ile tahmin edilmektedir.

Farklı laboratuvarlarda DLTS yöntemi ile bulunan Fe_i seviyeleri, $E_V + 39\text{eV}$ enerji değerinden $E_V + 45\text{eV}$ değerine kadar değişmektedir. Emisyon aktivasyon

enerjilerindeki bu deęişime, aktivasyon enerjisi 0.04eV-0.05eV aralığında olan deşiklerin Fe_i^0 atomları tarafından yakalanmaları neden olmaktadır [2, 9, 12]. Demir katkılı silikonda deşik yakalama tesir kesiti için literatürde, $\sigma_p(Fe_i) = (3.9 \pm 0.5) \times 10^{-16} \exp((0.045 \pm 0.005eV)/k_B T)$ (cm^2) [2], $\sigma_p = 1.6 \times 10^{-16} \exp(-0.043/k_B T)$ [9] ve $\sigma_p = 5.6 \times 10^{-16} \exp(-0.048/k_B T)$ [12] verileri mevcuttur. Bu veriler göz önüne alındığında arayer demir için EPR (Electron Paramagnetic Resonance) ve Hall olayı çalışmalarında bulunan $E_V + 38eV$ enerji deęeri ile DLTS çalışmalarından bulunan birincil taşıyıcıların sıcaklığa baęlı emisyon oranlarından elde edilen $E_V + 43eV$ ortalama enerji deęeri arasındaki farklılık deşik yakalama bariyeri 0.045eV ortalama deęeri ile açıklanabilir; çünkü Arrhenius eğrisi anlamında DLTS verilerinin evrimi emisyon entalpisi ve deşik yakalama bariyeri arasında ayırım yapılmasına olanak vermez, bunun yerine ikisinin toplamını verir. Ayrıca, foto-iletkenlik, foto-kapasitans, derin seviye optik spektroskopisi gibi optik yöntemlerle demir katkılanmış silikonda yapılan ölçümler sonucunda elde edilen kusur seviyesi ve valans bandı arasındaki geçişlere ait olan optik iyonizasyon enerjileri, yukarıda verilen termal iyonizasyon enerjileri ile aynı aralıklardadırlar [2]. Dolayısıyla, bu sonuçlar yukarıda belirtilen kusur seviyelerinin arayer demire ait olduğunu garantiler.

2.2. SİLİKON İÇİNDEKİ DEMİRİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİ VE DİFÜZYONU

Silikon içinde geçiş elementlerinin difüzyon katsayıları, nötr atomun ve iyonunun yarıçapının farklı olması ve difüze olan arayer atomları ile onları çevreleyen silikon matrisinin elektronik yoğunluğunun örtüşme mertebesinin farklı olması dolayısıyla metallerin yük durumlarına baęlıdır [2]. Farklı sıcaklıklarda demirin yük durumu, n-tipi ve p-tipi silikonda $Fe_i^{0/+}$ seviyelerinin Fermi seviyesine göre konumlarından hesaplanır [2, 13]. n-tipi silikonda E_F Fermi seviyesi, izole demir $Fe_i^{0/+}$ 'nın $E_{Fe_i^{0/+}} = 0.40 eV$ enerji seviyesinden büyük olduğundan demir nötr yük durumunda bulunur. p-tipi silikonda ise, $E_{Fe_i^{0/+}} + k_B T < E_F$ durumunda bütün kusur konumları Fermi seviyesinin altındadır ve elektron tuzaklanmış olacağından, demir nötr yük durumundadır. $E_{Fe_i^{0/+}} +$

$k_B T > E_F$ durumunda ise hemen hemen demirin tamamı pozitif yük durumundadır [13, 14].

Düşük sıcaklıklarda demirin yük durumu çok daha iyi belirlenmiştir: n-tipi silikonda nötral, boron katkılı p-tipi silikonda ise boronla çift yapmış ve pozitif yük durumundadır [2, 15, 16]. Demirin p-tipi silikonda 300K-625K sıcaklık aralığında, sıcaklığa bağlı davranışı dört fazda incelenebilir [13, 14]:

Faz I: 300K-370K: serbest demir konsantrasyonu azalırken $Fe_i B_s$ konsantrasyonu artar [13, 14]. $Fe_i^+ + B_s^- \rightleftharpoons Fe_i^+ B_s^-$ reaksiyonun yönü sağa doğrudur.

Faz II: 370K-435K: $Fe_i^+ + B_s^- \rightleftharpoons Fe_i^+ B_s^-$ reaksiyonu sola doğrudur. Çiftler ayrışarak Fe_i^+ konsantrasyonu artar. 435K civarında demirin tamamı pozitif yük durumuna geçer [13, 14].

Faz III: 470K-520K: Fe_i^+ ve $Fe_i^+ B_s^-$ konsantrasyonlarının ikisi de azalır [14]. Bu sıcaklıklarda $Fe_i^+ + e \rightleftharpoons Fe_i^0$ reaksiyonu sağa doğrudur. Çiftlerden kopan pozitif yüklü demirler de dahil olmak üzere pozitif yüklü demir, elektron yakalayarak nötr yük durumuna geçer.

Faz IV: 520K-625K: Fe_i türleri bu sıcaklık aralığında çökelekler oluştururlar [14].

Yukarıdaki betimlemeye göre, oda sıcaklığında p-tipi silikonda demir büyük çoğunlukla pozitif yük (Fe_i^+) durumundadır ve alıcı (akseptör) atomlarla çift yapar. Boron katkılı silikonda çiftler yaklaşık olarak 370K'den 470K'ye kadar olan sıcaklıklarda ayrışır ve Fe_i^+ konsantrasyonu artar [2, 13, 14]. 600K üzerindeki sıcaklıklarda Fermi seviyesi bant ortasına doğru hareket eder ve demir büyük oranda nötral duruma geçer [2]. Silikon içinde demirin difüzyon enerji bariyeri, aşağıda da vurgulanacağı gibi, literatürde geniş bir skalaya yayılmıştır (0.49eV-0.92eV). Dolayısıyla bu farklı enerjilerden dolayı

$$D(Fe_i) = D_0 \exp(-Q/k_B T) \quad (2.1)$$

ile verilen difüzyon katsayıları da farklılıklar göstermektedir. Burada, D_0 sıcaklıktan bağımsız difüzyon katsayısı ön-üsteli ve Q difüzyon enerji bariyeridir. Örneğin, Weber

[17] yüksek sıcaklıklarda ve 300K-400K sıcaklıklarında bulunan deneysel verileri ekstrapole ederek $D(Fe_i^+) = 1.3 \times 10^{-3} \exp(-0.68eV/k_B T)$ cm²/s elde etmiştir.

p- tipi silikonda Fe_i^+ difüzyonu için literatürde genellikle,

$$D(Fe_i^+) = 1.4 \times 10^{-3} \exp(-0.69eV/k_B T) \text{ (cm}^2\text{/s)} \quad (2.2)$$

[2] ifadesi verilir. Bununla birlikte, literatürde Fe_i^+ difüzyon bariyeri için 0.49eV [18] ve 0.92eV [19] aralığında değişen 0.69eV [15], 0.68eV [20], 0.75eV [21], 0.85eV [22], 0.66eV [23] gibi birçok değer mevcuttur. Ayrıca orta seviyede boron katkılı p-tipi silikonda nötral demir, Fe_i^0 'ın difüzyon enerji bariyeri için 0.80±0.01eV [24], 0.66±0.01eV [21], 0.88eV [25], 0.84eV [15], 0.56eV [19] değerleri ve difüzyon katsayısı ön-üsteli, D_0 için 10⁻² ve 10⁻³ cm²/s [15, 19] mertebelerinde değerler mevcuttur.

Yukarıda verilen sonuçların tümü demirin difüzyonunun yük durumuna bağlı olduğunu gösterir. Fe_i^+ ve Fe_i^0 için bulunan difüzyon enerji bariyerlerinin farklı olması Fe_i^0 atomu ve Fe_i^+ iyonunun atomik yarıçaplarının farklı olmasının neden olduğu elastik gerilim ve örgü polarizasyonu ile açıklanabilir [24]. Demir için bulunan difüzyon enerji bariyerlerinin birçok çalışmada farklı olmasının bir nedeni de demir-boron çiftlerinin oluşmasının ve ayrışmasının belirli sıcaklık bölgelerinde ayrı ayrı etkin olduğunu varsaymak olabilir [13, 14, 26]. Genel olarak demir-boron çiftlerinin oluşum hızı τ_{ass}^{-1} 300K-370K aralığında ayrışma hızı τ_{diss}^{-1} 'den büyük ve 370K'den büyük sıcaklıklarda ise $\tau_{ass}^{-1} < \tau_{diss}^{-1}$ kabul edildiğinden, her iki sürecin aynı sıcaklık bölgelerinde aktif olabileceği gerçeği ihmal edilmektedir. Bu yaklaşıklık, Fe_i^+ için bulunan difüzyon ve ayrışma enerji değerlerinin dağılımını açıklayabilir. Demirin p-tipi silikon içinde pozitif yük durumunda bulunması ortamda bulunan diğer katkı atomlarıyla çiftler oluşturmasına neden olur. Demir-akseptör çiftleri pozitif yüklü demirin difüzyonunu önemli ölçüde etkiler ve dolayısıyla demirin difüzyonu çalışılırken hesaba katılmalıdır. Bu çalışmada, demirin hem bağlanma hem de ayrışma süreçlerinin etkisinin gözlenebileceği bir model ele alınacaktır.

2.3. ARAYER DEMİRİN AKSEPTÖRLERLE YAPTIĞI ÇİFTLER

Bu çalışmada boron katkılı silikon kullanıldığından daha çok demirin boron ile yaptığı çiftler üzerinde durulacaktır. Demir akseptör çiftleri silikonun bant aralığında elektriksel olarak aktif merkezler oluştururlar. Bu merkezlerin konfigürasyonları ve yasak bant aralığında yarattıkları enerji seviyeleri EPR, DLTS ve Hall olayı çalışmalarında bulunmuştur [3, 4, 13, 14, 15, 27].

Oda sıcaklığında demir p-tipi silikon içinde pozitif yük durumunda çözünür ve bu iyonlar ortamdaki diğer negatif yüklü katkı atomları ile çift yaparlar. Bununla birlikte oda sıcaklığı civarında pozitif yüklü demir aynı zamanda hareketlidir ve difüze olmayı sürdürür [15, 27]. Fe_i^+ ve B_s^- arasındaki elektrostatik çekim, demir-boron çifti oluşumunun temel nedenidir ve reaksiyon, yük durumu tarafından [27], yani demirin Fe_i^+ , Fe_i^0 ve Fe_i^{++} durumları tarafından kontrol edilir. p-tipi silikonda Fermi enerjisi E_F , Fe_i donör seviyesinin daima altında olduğundan Fe_i pozitif yük durumudur. Bu durumda Fe_iB_s çifti, aşağıdaki reaksiyon ile betimlenebilir [13, 22, 27]:



Fe_iB_s çifti p-tipi silikonun bant aralığında birisi donör diğeri de akseptör olmak üzere iki stabil enerji seviyesi oluşturur. $E_v + 0.01eV$, donör seviyesi $(Fe_i^{+/++} B_s^-)^{0/+}$ yük durumuna ve $E_c - 0.26eV$ akseptör seviyesi ise $(Fe_i^{0/+} B_s^-)^{-/0}$ yük durumuna karşılık gelir [27, 28]. EPR deneylerinde ise bu akseptör seviyesi için $0.29eV$ [12] değeri bulunmuştur.

Genel olarak, Fe_iA_s çiftleri ($A_s = B, Al, Ga$) trigonal ve ortorombik simetriye sahip iki yapısal konfigürasyonda olurlar. Bu konfigürasyonların herbiri negatif, nötral ve pozitif yük durumlarından birinde bulunup her Fe_iA_s çifti için ikisi donör, ikisi akseptör seviyesi olmak üzere dört tane derin seviyeye neden olurlar [2, 23, 28, 29]. Fe_i , $\langle 111 \rangle$ yönünde A_s 'ye en yakın komşu konumda trigonal simetride yerleşir ve $\langle 100 \rangle$ yönünde ortorombik simetride ikinci en yakın komşu tetrahedral arayer konumlara yerleşir [2, 27, 29]. Fe_iB_s çiftleri trigonal konfigürasyonda kararlıdır (stabildirler) ve ortogonal konfigürasyonda yarı-kararlıdır (meta stabildirler) [23, 28, 29]. Fe_iB_s çiftleri,

simetrisi ve oluşturdıkları enerji seviyeleri Tablo1'de verilmiştir. Tablo Referans [29]'den alınmıştır.

Genel olarak demir-akseptör çiftlerinin oluşum (formasyon) ve ayrışma reaksiyonları, demir-akseptör çiftinin oluşması için demirin aşması gereken enerji bariyeri (bağlanma enerjisi) E_b , oluşan çiftlerin ayrılmaları için gerekli enerji olan ayrışma (dissociation) enerjisi E_{diss} ve arayer demirin difüzyon enerjisi E_m ile karakterize edilebilir. Boron ile çift yapan demir oranı,

$$\frac{N(FeB)}{N(Fe_i^+) \times N(B_s^-)} = \frac{Z}{N_i} \exp\left(\frac{E_b}{k_B T}\right) \quad (2.4)$$

bağıntısı ile verilir [21, 22]. Burada N yoğunlukları, N_i silikon örgüsündeki arayer konumlarının yoğunluğunu, k_B Boltzmann sabiti ve Z aynı simetriye sahip çiftin bir akseptör atomu etrafındaki olası oryantasyonlarının sayısını ifade eder. Literatürde boron-demir çiftlerinin bağlanma enerjileri 0.45eV [13, 18], 0.53eV [9], 0.58eV [30], 0.60eV [21] ve 0.65eV [22] olarak mevcuttur. Bağlanma enerjisindeki bu farklılıklar demirin ortamdaki başka kusurlarla yaptığı farklı etkileşmelerden kaynaklanıyor olabilir [2, 27]. Ayrıca bağlanma enerjisini hesaplamak için kullanılan farklı modellerin sonucu da farklı olabilir [27].

Tablo 2.1: $Fe_i B_s$ çiftlerinin simetrisi, yük durumları ve enerji seviyeleri.

Kusur	Simetri	Donor (d) Akseptör (a)	Enerji seviyesi E_i (eV)	Kararlı (+) Kararlı değil (-)
$(Fe_i B_s)^{0/+}$	trigonal	d	$E_v + 0.1$	+
$(Fe_i B_s)^{-/0}$	trigonal	a	$E_c - 0.26$ ± 0.03	+
$(Fe_i B_s)^{0/+}$	ortorombik	d	$E_v + 0.07$	-
$(Fe_i B_s)^{-/0}$	ortorombik	a	$E_c - 0.43$	-

Genel olarak demir-akseptör çiftlerinin oluşmasını sağlayan sürücü kuvvet pozitif demir iyonu ile negatif akseptör iyonu arasındaki elektrostatik çekim kuvvetidir. Örneğin; fosfor ve boron katkılanmış fakat hala n-tipi olan silikonda Fe_iB_s çifti gözlenmemiştir, çünkü n-tipi silikonda demir nötr yük durumundadır ve B_s^- ile çift oluşturamaz [27]. Bu aynı zamanda çift oluşturma reaksiyonunun yük durumuna bağlı olduğunu gösterir [27]. Demir-akseptör çift reaksiyonları için daha çok Coulomb etkileşimini içeren modeller önerilmiştir ve bağ enerjisi bu modellere göre hesaplanmıştır [13, 22, 26, 29]. Bununla birlikte Zhao ve diğ. [27] önerdikleri elektrostatik iyonik model, iki iyon çekirdeği arasındaki Coulomb etkisine ek olarak kısa erimli valans elektronik bulut polarizasyonundan kaynaklanan çekici etki ve Si atomu ile akseptör atomu arasındaki büyüklük farkından kaynaklanan akseptör civarındaki örgü bozulmasından kaynaklanan itici elastik etkiyi de hesaba katar. Bu model, iyon çiftlenim modelindeki [31] yakın komşuluklardan kaynaklanan etkileri valans elektronik bulut polarizasyonu ile betimler.

Difüzyon deneyleri süresince Fe_iB_s çiftlerinin hangi sıcaklıklarda oluşmaya başladıkları ve hangi sıcaklıklarda ayrıştıkları çok önemlidir. Ayrıca bu çiftlerin nasıl oluştukları, yani hangi reaksiyonlarla oluştukları difüzyon sürecini etkiler. Fe_iB_s çiftlerinin oluşumunun kinetiği difüzyon-limitli çökelme/tuzaklanma teorisi [32] ve Reiss ve diğ. [33] tarafından geliştirilen hareketli donörlerin durgun akseptörler tarafından tuzaklanması teorisi ile betimlenir. Reiss, durgun akseptör ile hareketli donör arasındaki etkileşimi, perdelenmiş bir Coulombic etkileşim ile betimledi. Bu teoriye göre, hareketli donör, durgun akseptör ile aralarındaki elektrostatik potansiyel (perdelenmiş Coulomb potansiyeli) ortalama termal enerjiye eşit veya büyük olduğunda yakalanır ve çift oluşur:

$$k_B T = \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 R_C} \exp\left[\frac{-R_C}{(\epsilon\epsilon_0 k_B T / q^2 p)^{1/2}}\right] \quad (2.5)$$

Burada R_C yakalanma yarıçapı, q elektron yükü, ϵ yarı-iletkenin di-elektrik geçirgenlik sabiti, ϵ_0 boşluğun elektriksel geçirgenliği ve p deşik (hole) yoğunluğudur. R_C genellikle birkaç nanometre büyüklüğündedir. Dolayısıyla yukarıda verilen elektrostatik potansiyelde üstel terim bire yakınsar ve iyi bir yaklaşıklıkla Coulombic potansiyele eşit alınabilir. Bu durumda $R_C = q^2 / (4\pi\epsilon\epsilon_0 k_B T)$ olur [32, 33].

Reiss, difüze olan iyonların, ortamdaki zıt yüklü, durağan en yakın birinci komşu iyonlarla çiftler oluşturduğunu varsayarak, difüzyon için ikinci Fick yasası denkleminde hareketli iyonların sayısının e^{-1} oranına inmesi için geçen zamanı, yani relaksasyon zamanını, D difüzyon katsayısı ve N_A akseptör konsantrasyonu olmak üzere

$$\tau = \frac{1}{4\pi DN_A R_C} \quad (2.6)$$

olarak hesapladı. Bu aynı zamanda hareketli iyonların çift oluşturma zaman sabiti, τ_{ass} 'dir. Saf Coulombic potansiyel için bulunan R_C ve fiziksel sabitlerin değeri yerine yazıldığında (2.6) eşitliği, demir iyonlarının çift oluşturma zaman sabiti için

$$\tau_{ass} = \frac{\epsilon\epsilon_0 k_B T}{q^2 D(Fe_i) N_A} \approx \frac{566,7T}{D(Fe_i) N_A} \quad (2.7)$$

olarak yazılabilir [2, 32]; $D(Fe_i)$ pozitif yük durumundaki arayer demirin difüzyon katsayısıdır.

Donor-akseptör çiftlerinin ayrışma kinetiği, bir donor iyonunun en yakın komşu durgun akseptör iyonunun konumundan daha uzağa zıplaması için gerekli ayrılma bariyeri (ayrılma enerjisi), E_{diss} ile belirlenir. Ayrılma zaman sabiti

$$\tau_{diss}^{-1} = \tau_0^{-1} \exp\left(-\frac{E_{diss}}{k_B T}\right) \quad (2.8)$$

ile verilir [26, 27]; τ_0^{-1} deneme frekansıdır. Literatürde $Fe_i B_s$ çiftlerinin ayrılma enerjisi için çok az deneysel veri mevcuttur: 1.17eV [2], 1.40eV [34], 1.05eV [35].

p-tipi silikonda demir-boron çift oluşumu 370K'e kadar artar ve bu sıcaklıktan sonra azalarak serbest pozitif demir miktarı artar [13, 14]. Buna göre, pozitif demirin difüzyonu 370K'e kadar çift oluşum reaksiyonuna bağlıdır. 370K'den sonra çift ayrışım reaksiyonu demirin difüzyonunu kontrol eder. Demirin difüzyon ve ayrışım parametrelerini belirlemek, sistemin sistematik bir incelemesini gerektirir.

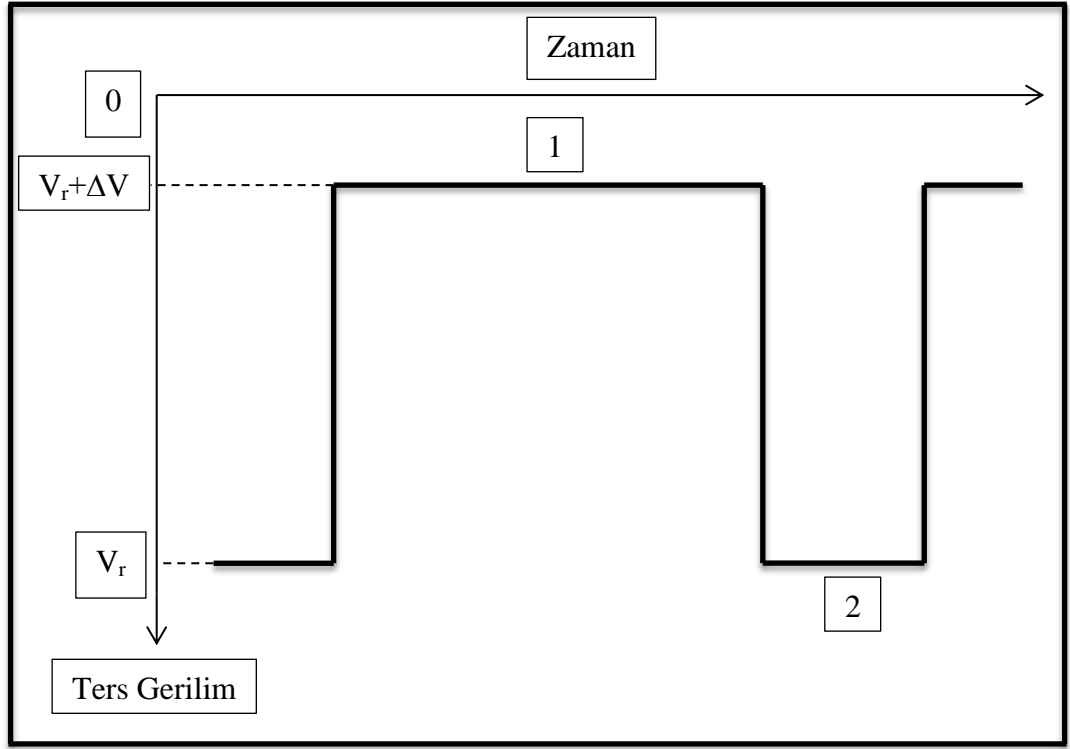
3. MALZEME VE YÖNTEM

3.1. GİRİŞ

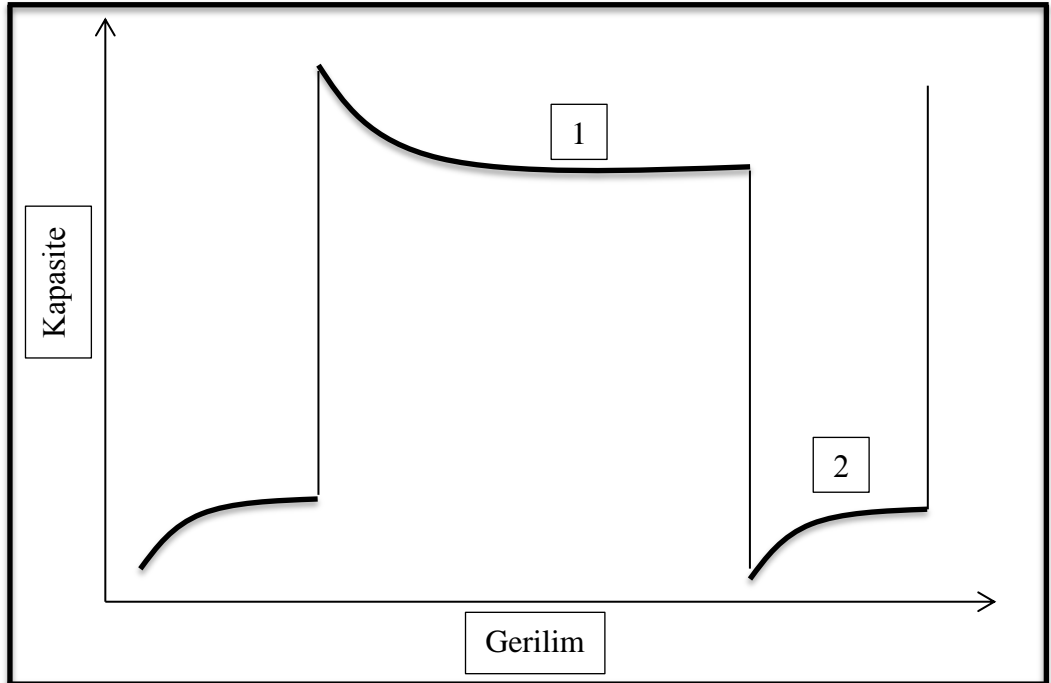
Bakır, demir gibi geçiş metalleri silikon içinde yüksek mobiliteye sahip kusurlar oluştururlar [36]. Arayer demirin silikon içinde sürüklenmesi ilk olarak fotokapasitans ve DLTS yöntemleri ile çalışılmıştır [16]. Koveshnikov ve diğ. [37] boron katkılı p-tipi silikona demir katkıladıktan sonra bir Schottky eklemine deplasyon bölgesine yüksek frekanslı ters gerilim uygulayarak elektrik alan altında demirin sürüklenmesini incelediler. Demirin p-tipi Schottky diyotunun deplasyon bölgesinde sürüklenmesini, diyotu ters besleyerek ele alan sadece iki çalışma mevcuttur [16, 37].

Bakır silikon içinde en hızlı difüze olan arayer kusurdur. Heiser ve Mesli [38], bakır katkıladıkları p-tipi Schottky diyotuna ters gerilim uygulayarak pozitif yüklü bakırın ters gerilim altında Schottky diyotunun deplasyon bölgesinde sürüklenmesinden kaynaklanan kapasite geçişini gözlemlediler ve bunu yeni bir yöntemle (TID yöntemi ile) ele alarak bakırın p-tipi silikonda difüzyon parametrelerini elde ettiler. Bu yöntem aşağıda detaylı olarak incelenecektir ve demirin bir Schottky diyotunun deplasyon bölgesinde elektrik alan altında sürüklenmekten sonra elektrik alanın kaldırılmasıyla geriye difüze olmasını betimleyen bir model önerilecektir.

Çalışmada uygulanacak deneysel yöntemler göz önüne alındığında, Bölüm 3.2’de anlatılacağı gibi, deneyde numune olarak kullanılacak en uygun aygıt p-tipi bir Schottky diyotudur. Bir Schottky diyotu Şekil 3.1.1’deki gibi periyodik bir puls uygulanarak ters beslendiğinde puls süresince ve puls kaldırıldığında diyotun deplasyon bölgesinin kapasitesinde Şekil 3.1.2’deki gibi bir değişim gözlenir [38]. Aşağıda anlatılacak yöntemlerde bu değişimler modellenerek, gerçekleşen fiziksel süreçler açıklanmaya çalışılacak ve demirin p-tipi silikondaki difüzyonunun karakterize edilmesinde kullanılacaktır.



Şekil 3.1.1: Schottky diyoduna uygulanan gerilim pulsu.



Şekil 3.1.2: Şekil 3.1.1'deki gerilim pulsu altında Schottky diyodunun kapasitesinin değişimi.

3.2. İYON SÜRÜKLEME GEÇİŞ YÖNTEMİ (TID)

TID yöntemi, bir Schottky diyotunun deplasyon bölgesinde veya pn-ekleminde, uygulanan ters gerilimin etkisiyle belirli bir sıcaklıkta meydana gelen zamana bağlı kapasite değişimlerine dayanan bir yöntemdir. İlk defa Heiser ve Mesli [38] tarafından önerilen bu yöntem temel olarak DLTS yönteminin bir türevidir.

Birincil taşıyıcıları ile aynı işaretli yüke sahip üniform iyon dağılımı içeren bir yarı-iletken aygıtta ters gerilim uygulandığında (ters beslendiğinde) hareketli iyonlar birincil taşıyıcılarla aynı yönde fakat, çok daha yavaş sürüklenirler [38]. Bu sürüklenme bir kapasite geçişine neden olur. Elektrik alan derinlikle azaldığından iyonlar deplasyon (boşaltılmış) bölgesinin sınırına birikirler. Nötral bölgede ise iyon dağılımı termal difüzyon ile tekdüze bir hal alır. Uygulanan ters gerilim azaltıldığında veya kaldırıldığında deplasyon bölgesinin sınırına birikmiş olan yüklü iyonlar boşalttıkları bölgeye geri difüze olurlar (Şekil 3.1.2 ve Şekil 3.2.1). Orta seviyede katkılanmış örneklerde elektrik alanı 10^4 - 10^5 V/cm mertebesindedir, dolayısıyla yüklü safsızlıkların elektrik alanı etkisi ile deplasyon bölgesinin sınırına birikme hızları, geriye doğru termal olarak difüze olma hızlarından çok daha yüksektir. Periyodik bir şekilde ters gerilim uygulayıp kaldırarak iyon dağılımının birikmesi ve tekrar geri difüze olarak düzlenmesi sağlanabilir. Birikme ve düzlenme süreçleri difüzyon limitli olduklarından bu süreçlerin analizi yeni fiziksel bilgiler sağlar [38].

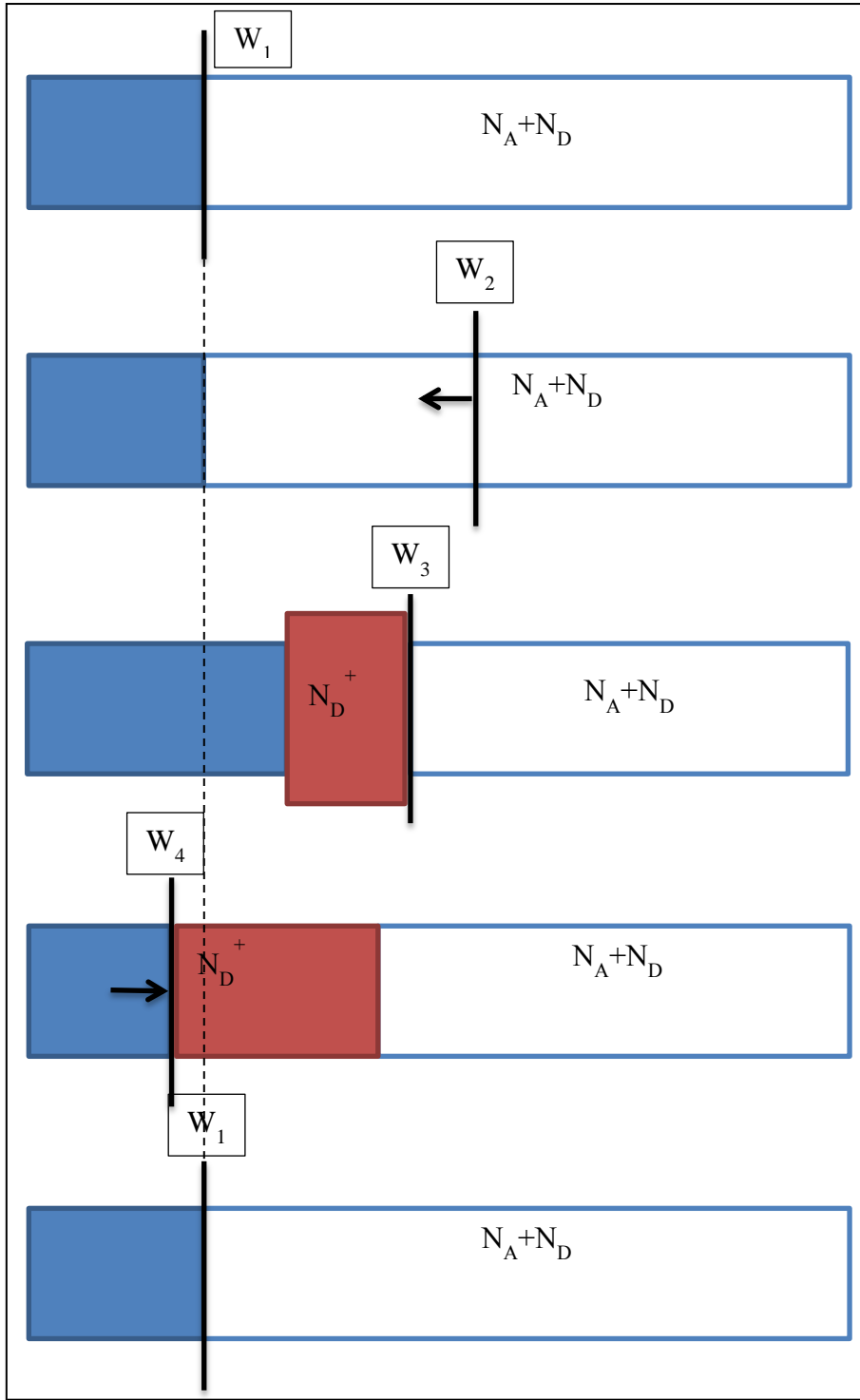
Schottky diyotunun deplasyon bölgesinin yük dağılımındaki değişim, diyotun deplasyon bölgesinin genişlemesi ve dolayısıyla kapasitesinin değişimi ile sonuçlanır. Bu nedenle yukarıda bahsedilen iyon dağılımındaki değişim bir Schottky diyotunun kapasitesi ölçülerek gözlemlenebilir [38]. Diyota ters gerilim pulsu uygulandığında (diyot ters beslendiğinde) iyonlar deplasyon bölgesinin sonuna doğru sürüklenirler ve buna bir kapasite geçişi eşlik eder. Bu süreç DLTS ölçümlerinde derin seviyelerin dolması ve boşalması durumlarında meydana gelen kapasite geçişlerine benzer. İyonların belli bir frekansta uygulanan ters gerilim altında mobiliteleri sıcaklığa bağlı olduğundan, DLTS'te tuzakların dolma ve boşalma zaman sabitlerinin sıcaklığa bağlı olması gibi, TID yönteminde de birikme (akümülyasyon) ve düzlenme (geri difüze olma) zaman sabitleri sıcaklığa bağlıdır. Örneğin, belli bir frekansta uygulanan ters gerilim atması (pulsu) altında bazı sıcaklıklarda iyonların mobilitesi çok düşük olabilir ve bu durumda

iyonlar elektrik alanını takip edemezler, yüksek sıcaklıklarda ise iyonların mobilitesi çok yüksektir ve meydana gelen kapasite geçişi çok kısa olduğundan gözlemlenemez. Orta sıcaklıklarda ise iyonların mobilitesi iyonların yer değiştirmesi için gerekli zaman sabitinin pulsun periyodu ile karşılaştırılabilir olmasına izin verecek mertebededir ve bu durumda sıcaklık taranarak DLTS pikine benzer bir TID piki gözlemlenir.

DLTS ve TID arasındaki bu benzerliklere rağmen iki yöntemi birbirinden ayıran önemli farklılıklar vardır. TID yönteminde ters gerilim altında iyonların sürüklenmesini betimleyen birikme zamanı τ_a , DLTS taşıyıcı emisyon zamanına karşılık gelir ve W ters gerilim altında deplasyon bölgesi genişliği, v_d iyon sürüklenme hızı olmak üzere, W/v_d mertebesinde [38]. Ters gerilim kaldırıldığında iyonların geri difüzyonu için gerekli zaman olan iyon düzlenme zaman sabiti τ_f , DLTS tuzak dolma zamanına eşdeğerdir ve W^2/D ile orantılıdır; burada D iyonların difüzyon katsayısıdır. TID'de τ_f/τ_a oranı, V_r uygulanan ters gerilim olmak üzere $qV_r/k_B T$ ile orantılıdır ve birden büyüktür. DLTS'de böyle bir durum yoktur ve tuzakların taşıyıcı yakalama hızı emisyon hızından çok daha büyüktür ve genellikle ters gerilimden bağımsızdır. Diğer bir farklılık ise kapasite geçişlerinin şeklinin sıcaklığa bağlılığı ile ilgilidir: DLTS'de derin seviyelerin sıcaklığa bağlılığı uygulanan ters gerilimden bağımsız olarak sabittir. TID'de ise pikin konumu ve şekli ters gerilime bağlıdır.

Heiser ve Mesli [38] yukarıda anlatılanları aşağıdaki varsayımlar ışığında teorik bir modelle formüle ettiler:

- i. İyon sürüklenme periyodu (ters gerilim uygulandığı süre) boyunca iyonların termal olarak difüze olmaları ihmal edilir.
- ii. Mobil iyonların konsantrasyonu katkılanmış sığ akseptör seviyelere göre çok az olduğu varsayılır. Bu elektrik alanının iyonların sürüklenmesi ile değişmeyeceğini garanti eder.
- iii. Arkaplan (boron) konsantrasyonunun üniform (tekdüze) olduğu varsayılır; böylece deplasyon bölgesinin elektrik alanı $E(x) = E_M(1 - x/W)$ şeklinde derinliğe lineer bağlı kalır.
- iv. Deney süresince toplam iyon konsantrasyonunun sabit olduğu varsayılır.



Şekil 3.2.1: p-tipi Schottky diyodunun deplasyon bölgesinin Şekil 3.1.1 ile tasvir edilen gerilim pulsu altındaki zamansal evrimi: Mavi kısımlar boşaltılmış bölgeyi, beyaz kısımlar homojen olarak dağılmış alıcı (N_A) ve verici (N_D) konsantrasyonunu ve kırmızı kısımlar hareketli verici konsantrasyonunu göstermektedir. W_i ($i=1, 2, 3, 4$) deplasyon bölgesinin sınırlarını göstermektedir.

Yukarıdaki varsayımlar ve uygun sınır ve başlangıç koşulları altında

$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\partial(N(x,t)\mu_{eff}E(x))}{\partial x} \quad (3.1)$$

difüzyon-sürüklenme denkleminin sağda ilk terim (difüzyon terimi) atılarak, sürüklenme kısmının çözümü pozitif yüklü demirin elektrik alan altında sürüklenmesini verecektir. Burada D pozitif yüklü demirin difüzyon katsayısı, $E(x)$ yukarıda belirtildiği gibi yarı-iletken derinliğe lineer olarak bağlı elektrik alanı, μ_{eff} ise yüklü kusurların efektif mobilitesidir. Efektif mobilite f^+ pozitif demirin oranı olmak üzere $\mu_{eff} = \mu f^+$ [16] olarak tanımlanır ve $\mu = k_B T / qD$ Einstein bağıntısına uyan pozitif demirin mobilitesidir. f^+ , pozitif demirin oranı ise Shockley-Read-Hall istatistiğinden belirlenebilir [39]: yarı-iletken içinde yük yakalamanın olmadığı bir yüksek elektrik alanına sahip bölgede bir kusurun yük durumu tamamen deşik ve elektron emisyon süreçleri ile belirlenir. Buna göre pozitif yüklü demirin oranı, e_p ve e_n sırasıyla deşik ve elektron emisyon hızları (oranları) olmak üzere [16, 39]

$$f^+ = \frac{e_n}{e_n + e_p} \quad (3.2)$$

ile verilir. Denklem (3.1)'den difüzyon terimi atılarak elektrik alan için $E(x) = E_M(1 - x/W)$ ve efektif mobilite yerine $\mu e_n / (e_n + e_p)$ ve p-tipi yarı-iletken için deplasyon bölgesinin maksimum elektrik alanı $E_M = qN_A W / \epsilon \epsilon_0$ yazılırsa, TID modeli için,

$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial t} = - \frac{\partial(N(x,t)\mu_{eff}E(x))}{\partial x} \quad (3.3)$$

sürüklenme denkleminin çözümü olarak iyon dağılımının zamansal evrimi

$$N(t) = N_{t0} \exp\left(\frac{t}{\tau_a}\right) \quad (3.4)$$

[16, 38, 40] ve zaman iyon birikme sabiti

$$\tau_a^{-1} = \frac{q^2 N_A D e_n}{k_B T \epsilon \epsilon_0 (e_n + e_p)} \quad (3.5)$$

olarak bulunur. N_{t0} , $t = 0$ anında üniform ve konumdan bağımsız başlangıçtaki hareketli iyon konsantrasyonu, N_A akseptör konsantrasyonu, ϵ yarı-iletkenin di-elektrik

sabiti, ε_0 boşluğun elektriksel geçirgenliği ve q birim elektrik yüküdür. Son olarak Heiser ve Mesli (iv) koşulunu kullanarak konum için

$$x(t) = W \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_a}\right) \right) \quad (3.6)$$

basamak konum fonksiyonunu elde ettiler. (3.4) ve (3.6) eşitliklerinden

$$N(x) = \frac{N_{t0}W}{W-x} \quad (3.7)$$

sonucu bulunur.

Bir V ters gerilimi altında herhangi bir t zamanında V_b oluşum gerilimine (built in voltage) sahip bir Schottky diyotunun deplasyon bölgesinin genişliği ve kapasitesi sırasıyla

$$W(t) = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0(V_b-V)}{q(N_A-N(t))}} \quad (3.8)$$

$$C(t) = \sqrt{\frac{q\varepsilon\varepsilon_0(N_A-N(t))}{2(V_b-V)}} \quad (3.9)$$

ifadeleri ile verilir. Burada N_A akseptör konsantrasyonu $N(t)$ hareketli iyon konsantrasyonundan çok büyük olmak koşuluyla, (3.4) eşitliği (3.9) eşitliğinde yerine yazılırsa,

$$C(t) = C(0) \left\{ 1 - \frac{N_{t0}}{2N_A} [1 - \exp(-t/\tau_a)] \right\}, \quad N_{t0}/N_A \ll 1 \quad (3.10)$$

bulunur; burada $C(0) = \sqrt{\frac{q\varepsilon\varepsilon_0N_A}{2(V_b-V)}}$ diyoda gerilim ilk uygulandığı andaki kapasite değeridir. $t \rightarrow \infty$ için (3.10) eşitliği $C(\infty) = C(0) - C(0)N_{t0}/2N_A$ olur ve buradan (3.10) ifadesinde $N_{t0}/2N_A$ yerine $[C(0) - C(\infty)]/C(0)$ yazılırsa

$$C(t) - C(0) = [C(\infty) - C(0)][1 - \exp(-t/\tau_a)] \quad (3.11)$$

TID kapasite geçiş denklemi elde edilir. Bu denklem DLTS denklemi ile aynıdır ve her iki yöntem için bulunan çözümler, tuzak konsantrasyonunun katkı konsantrasyonundan çok az olduğu durumda geçerlidirler.

Efektif mobilite tanımlanırken çift oluşturma reaksiyonu düşünülmedi fakat demir p-tipi malzemede pozitif çözünüp ortamdaki negatif yüklü iyonlarla çift oluşturduğundan mobiliteye en büyük etki çift reaksiyonlarından gelmelidir. Yarı-iletken içinde donör-akseptör çifti (akseptörler hareketsiz) durumunda bir D_{eff} , efektif difüzyon katsayısı, tanımlanır ve N_D hareketli donörlerin sayısı, N_A hareketsiz akseptörlerin sayısından çok az ise [33]

$$D_{eff} = \frac{D_i}{1 + \Omega N_A} \quad (3.12)$$

ile verilir. Burada D_i kusurun katkısız yarı-iletkendeki saf difüzyon katsayısı ve Ω dinamik denge durumunda donör-akseptör çifti oluşma reaksiyon sabitidir. Reiss ve diğ. [21] iyonların çift oluşturma reaksiyonunu seyreltik bir çözelti gibi ele alarak Ω 'yı hesapladılar. Bu teoriye göre, aşırı seyreltik bir çözeltide ($N \gg P$) donör-akseptör çifti konsantrasyonu P ve çift oluşturmayan iyonların konsantrasyonu, $N - P$ olmak üzere

$$\Omega = \frac{P}{(N-P)^2} \approx \frac{P}{N^2} = 4\pi \int_a^{R_c} r^2 \exp\left[\frac{V(r)}{k_B T}\right] dr \quad (3.13)$$

olarak hesaplanır; a en yakın komşuya olan denge uzaklığı, R_c yakalanma yarıçapı, $V(r)$ donör-akseptör etkileşim potansiyelidir. Bu ifade, iyonlar arasındaki çekici etkileşim potansiyeli $V(r)$ 'nin şekline bağlıdır. Ω için reaksiyon kinetiğinden iyonların çift oluşturmalarının difüzyon limitli olduğunu, yani hareketli iyonun (donör) bir konumdan diğerine geçerken durgun iyon (akseptör) yakalandığını gösteren daha açık bir ifade bulunabilir. $Fe_i^+ + B_s^- \rightleftharpoons (Fe_i^+ B_s^-)^0$ reaksiyonunun ileri reaksiyon sabiti (yakalanma oranı/hızı) k_d ve geri reaksiyon sabiti (çift ayrışma oranı/hızı) k_a olsun. Reaksiyon dengede ise

$$\Omega^{-1} = \frac{k_d}{k_a} = \frac{[(Fe_i^+ B_s^-)^0]}{[B_s^-][Fe_i^+]} \quad (3.14)$$

yazılır. İyonlar arasında Coulombic bir etkileşim varsa, yakalanma hızı $k_a = 4\pi R_c D_i$ ile verilir [21]. Ayrışma hızı her zaman $k_d = k_{d0} \exp(-E_d/k_B T)$ Arrhenius bağıntısı ile deneysel olarak hesaplanabilir ve iyonların ayrışma zaman sabiti τ 'ye eşittir; k_{d0} deneme frekansıdır. E_d çiftlerin ayrışması için gerekli enerjidir. k_a ve k_d için verilen ifadeler Denklem (3.14)'de yerine yazıldığında

$$\Omega = \frac{4\pi R_c D_i}{v} = \frac{4\pi R_c D_i}{k_{d0} \exp(-E_d/k_B T)} \quad (3.15)$$

elde edilir. Bu eşitlik çekici etkileşim potansiyelini açık bir şekilde içermediğinden potansiyelin şeklinden bağımsızdır ve iyonların tuzaklanmasının difüzyon limitli olduğunu ifade eder [41]. Yukarıda her iki durumda da çift oluşturma reaksiyon sabiti, Ω , reaksiyonun termal denge olduğu koşulundan elde edildi. Sıcaklığa bağlı ölçümlerde termal denge varsayımı doğru bir yaklaşıklık değildir; dolayısıyla termal denge koşulu altında elde edilen efektif difüzyon katsayısında bir düzeltme yapmak gerekir.

Heiser ve Weber [36] bir Schottky diyotunun deplasyon bölgesinde iyonların sürüklenmesi sonucu meydana gelen kapasite geçişlerini, iyonların difüze olmalarını ve ortamdaki zıt yüklü katkı atomlarıyla çift oluşturmalarını hesaba katan bir bağlaşık denklem sistemini nümerik olarak çözerek hesapladılar. Bu model bir sonraki kısımda ele alınacaktır. Heiser ve Weber bu çözümler sonucunda (3.5) ve (3.12) denklemlerine aşağıdaki gibi düzeltmeler önerdiler:

$$\tau_a^{-1} = \alpha \frac{q^2 N_A D}{k_B T \epsilon \epsilon_0} \quad (3.16)$$

$$D_{eff} = \frac{D_i}{1 + \beta \Omega N_A} \quad (3.17)$$

Burada α ve β boyutsuz reel parametrelerdir. β boyutsuz parametresi yukarıda bahsedilen termal denge varsayımından dolayı gelen düzeltmedir. (3.5) ifadesi elde edilirken (3.1) denkleminde iyonların termal olarak difüze olmaları ihmal edildi. Bu yaklaşıklığa göre (3.6) eşitliğine göre yer değiştiren iyonlar deplasyon bölgesinin kenarına birikeceklerdir ve ters gerilim süresi boyunca orada kalacaklardır; oysa deplasyon bölgesinin sınırına biriken iyonlar bir konsantrasyon gradyenti meydana getirirler ve bu konsantrasyon gradyenti termal olarak geriye difüze olur. Heiser ve Weber [36] iyonların termal difüzyonla geriye doğru difüze olmalarının TID zaman sabitinde yaratacağı farkı α çarpanı ile gösterdiler ve bu parametreyi bakır için nümerik olarak çözdükleri diferansiyel denklemlerin sonuçlarına (3.16) ifadesini fit ederek elde ettiler. (3.15) ve (3.17) eşitlikleri (3.16) ifadesinde yerlerine yazılırsa

$$\tau_a = \alpha \frac{\epsilon \epsilon_0 k_B T}{q^2 N_A D_i} + \alpha \beta \tau_{diss} \quad (3.18)$$

elde edilir. Burada $\tau_{diss} = v^{-1}$ ayrışma (dissociation) zaman sabitidir. Bu eşitlikte sağ taraftaki ilk terim çift yapmayan iyonların deplasyon bölgesindeki ortalama sürüklenme zamanını, ikinci terim ise çift yapmış iyonların ayrışmasını betimler. $\tau_a \gg \beta\tau_{diss}$ ise iyonların çift oluşturması çok azdır ve zaman sabiti iyonların deplasyon bölgesi içinde saf (intrinsic) sürüklenmeleri tarafından belirlenir [41]. $\tau_a \approx \beta\tau_{diss}$ durumunda ise iyonların çift oluşturmaları başattır ve sürüklenme terimi sıfıra yaklaşır. Bu durumda τ_a , TID zaman sabitinden sürüklenen iyonların saf difüzyon katsayıları ile ilgili bilgi, ölçüm hataları kadar küçüldüğünden buradan bu bilgiyi elde etmek mümkün değildir [41]. TID yöntemi, literatürde genellikle silikon içinde Cu difüzyonuna uygulanmıştır. Lyubomirsky ve diğ. [42] tarafından CdT, Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te ve CuInSe₂ içinde Ag, Li ve Cu elementlerinin difüzyonuna uygulanmıştır.

Bölümün başında belirtildiği gibi demirin silikon içinde elektrik alanın etkisi ile sürüklenmesine direkt konu alan çok az çalışma vardır, fakat demir de tıpkı bakır gibi p-tipi silikon içinde pozitif olarak çözünen ve hızlı difüze olan bir kusurdur; dolayısıyla yukarıda anlatılan yöntem demirin difüzyonuna uygulanabilir. Bu çalışmada uygulanacak yöntem, TID yöntemi üzerine kurulmuştur. Şekil 3.1.2’de verilen kapasite geçişinin 2 ile işaretlenen kısmı TID yöntemiyle kapasite geçişinin 1 ile işaretlenen kısmı aşağıda anlatılacak olan TIDIF yöntemiyle incelenecektir.

3.3. İYON DİFÜZYON GEÇİŞ YÖNTEMİ (TIDIF)

3.3.1. Teori

TIDIF yöntemi [40] Şekil 3.2.1’de gösterilen sinyalin (1) ile işaretlenen yani ters gerilimin olmadığı kısmı incelemek için geliştirildi ve sadece p-tipi silikonda bakır difüzyonuna uygulandı [40]. Yöntemi anlatmadan önce p-tipi silikon kullanılarak yapılan Schottky diyoduna uygulanan ters gerilim kaldırıldığında kapasite geçişine neden olan süreç açıklanmalıdır. Ters gerilim kaldırıldığında veya azaltıldığında, ters gerilim altında deplasyon bölgesinin sonuna sürüklenmiş olan yüklü iyonlar geri difüze olarak başlangıçtaki konsantrasyon dağılımını yeniden sağlarlar. Bu süreç Şekil 3.1.2 ve Şekil 3.2.1 yardımıyla açıklanacaktır. Şekil 3.2.1’de kabaca bir Schottky diyotunun uzay yükü bölgesinin (deplasyon bölgesinin) büyüklüğündeki değişim gösterilmiştir. Bu aynı zamanda deplasyon bölgesinin yük dağılımındaki değişime karşılık gelir. Mavi bölge

deplasyon bölgesidir; burada negatif yüklü akseptörler vardır. Demir katkılanmış numunede burada bir miktar Fe_i^0 , FeB çiftleri ve Fe_i^+ bulunabilir. Fe_i^0 ve FeB çiftleri deplasyon bölgesinin büyüklüğünü etkilemezler fakat Fe_i^+ etkiler. Burada Fe_i^+ konsantrasyonunun B_s^- konsantrasyonuna oranının birden çok çok küçük olduğu varsayılır: $([Fe_i^+]/[B_s^-]) \ll 1$. Beyaz kısımda ise akseptör ve donör ($N_A + N_D$) dağılımı birlikte gösteriliyor. Demir katkılı numune için bu bölgede FeB çiftleri serbest Fe_i^+ ve çift yapmamış B_s^- iyonları mevcuttur. Kırmızı bölge ise hareket eden pozitif yüklü iyonları yani Fe_i^+ dağılımı gösterilmektedir. Ters gerilim kaldırılmadan hemen önce deplasyon bölgesi sınırı W_3 'tedir. Ters gerilim kaldırıldığında veya azaltıldığında deplasyon bölgesi W_4 'e daralacaktır. Bu, Şekil 3.1.2'de 1 ile işaretlenen geçişin başlangıç noktasına tekabül eder. Deplasyon bölgesinin sınırı W_4 'deyken daha önce ters gerilimin etkisiyle W_3 sınırına birikmiş olan serbest iyonların boşalttıkları alana geri difüze olmaları nedeniyle, deplasyon bölgesi tekrar W_1 'e genişlemeye başlar ve diyodun kapasitesinde bir geçiş meydana gelir. Bu geçişin sonunda deplasyon bölgesinin sınırı, tekrar ilk konumu olan W_1 'e gerilemiştir. TIDIF yöntemi ile bu zamana bağlı kapasite geçişi farklı sıcaklıklarda ölçülerek, elde edilen veriler analiz edilecektir.

p-tipi Schottky diyotunun deplasyon bölgesinin genişliği iyonize olmuş katkıların konsantrasyonuna bağlıdır. Diyodun deplasyon bölgesinde tuzakların boşalması (emisyonu) ve bunu takip eden bulkın (oylumun) içine doğru yüklü taşıyıcıların sürüklenmesi, yüklü katkıların dağılımında değişime neden olur [36]. Bu değişim, diyodun kapasitesinde bir geçiş olarak gözlemlenir. Diyoda ters gerilim uygulandığında, önce birincil taşıyıcılar (burada deşikler) hızla hareket eder, ardından pozitif yüklü donörler hareket eder. Birincil taşıyıcıların elektrik alan altında sürüklenme hızları 10^6 cm/s mertebesinde olduğundan, neden oldukları kapasite geçişleri iyonların sürüklenmesinden kaynaklanan kapasite geçişlerine göre çok daha hızlıdır. Diyoda uygulanan ters gerilim pulsu 0.01Hz-1Hz gibi düşük frekanslarda ise birincil taşıyıcıların neden olduğu kapasite geçişlerini gözlemlemek mümkün değildir. Dolayısıyla Şekil 3.2.1'de 2 ile gösterilen geçiş pozitif yüklü iyonların deplasyon bölgesi sonuna doğru hareketlerinden kaynaklanmaktadır. Bu süre boyunca kapasitede üstel bir büyüme olurken, Şekil 3.2.1'de gösterildiği gibi deplasyon bölgesinde de bir küçülme meydana gelir ve ters gerilim pulsu sonunda deplasyon bölgesinin büyüklüğü W_3 olur. Buna neden olan süreç şöyle olabilir: Ters gerilim uygulandığı anda deplasyon

bölgesinin büyümesi ile bu aralıkta kalan birincil taşıyıcılar bölgeyi boşaltır, ardından daha yavaş hareket eden pozitif yükler deplasyon bölgesinin sonuna doğru birikirler ve burada negatif yüklü akseptörleri pasifize ederek deplasyon bölgesinin biraz küçülmesine, yani W_3 'e gerilemesine neden olurlar. Ters gerilim kaldırıldığında ise deplasyon bölgesi daralır. Deplasyon bölgesi ters gerilim altında W_3 'e genişlediğinde daha önce deplasyon bölgesinin dışında kalan durağan B_s^- iyonlarına bağlanmış olan deşikler elektrik alan etkisiyle bulkün içine sürüklenirler. Uygulanan ters gerilim kaldırıldığında ise deplasyon bölgesinin daralmasıyla deşikler hızla daralan bölgeye hareket ederek, negatif boron atomlarına bağlanırlar ve deplasyon bölgesinin W_4 'e kadar daralmasına neden olurlar. Diğer yandan daha yavaş olan pozitif yüklü iyonlar deplasyon bölgesi sonunda bir konsantrasyon gradyenti oluşturmuşlardı ve ters gerilim kaldırıldığında boşalttıkları bölgeye sıcaklıkla orantılı olarak difüze olurlar. Boşalttıkları bölgeye difüze olan pozitif iyonlar negatif yüklü akseptörleri pasifize ederken deşiklerin yayınlanmasına neden olurlar ve bu süreç sonunda deplasyon bölgesi W_1 denge konumuna genişler. Bu süreç yine bir kapasite geçişiyle sonuçlanır, fakat bu geçiş, ters gerilimin olduğu kısımda meydana gelen kapasite geçişine ters yöndedir ve deplasyon bölgesinin büyümesinin bir sonucudur.

Yukarıdaki anlatım demirin sıcaklığa bağlı davranışını hesaba katmadan pozitif yüklü iyonların bir Schottky diyotunu deplasyon bölgesinde elektrik alan altında sürüklenmeleri ve elektrik alan kaldırıldığında geri difüzyonunu betimler. Tam bir betimleme için demirin p-tipi silikonda sıcaklığa bağlı davranışını da hesaba katmak gerekir.

Demirin sıcaklığa bağlı davranışı Bölüm 2.2'de oda sıcaklığından 670K'ye kadar dört fazda betimlendi. Demir-boron çiftlerinin ayrışımı, oda sıcaklığında cihazın elektrik alanı altında dahi meydana gelir ve Fe_i^+ serbest kalır. Faz I'e göre oda sıcaklığından 370K'ye kadar $Fe_i^+ + B_s^- \rightleftharpoons Fe_i^+ B_s^-$ reaksiyonu sağa doğrudur, dolayısıyla oda sıcaklığında Fe_i^+ oluşsa dahi daha çok miktarda Fe_i^+ , B_s^- ile çift yapacak. Bu durumda $Fe_i^+ B_s^-$ çiftlerinin oluşumu arttığından dolayı pozitif demirin elektrik alan altında sürüklenmesi ve elektrik alan kaldırıldığında geri difüzyonu yavaşlar. Faz II'ye göre $Fe_i^+ + B_s^- \rightleftharpoons Fe_i^+ B_s^-$ reaksiyonu 370K-435K sıcaklık aralığında sola doğrudur ve serbest kalan Fe_i^+ iyonları uygulanan ters gerilimle daha hızlı bir şekilde deplasyon

bölgesinin sonuna doğru sürüklenirler ve ters gerilim kaldırıldığında yine boşalttıkları bölgeye doğru konsantrasyon gradyentinden dolayı termal olarak difüze olurlar. Bu durumda pozitif demirin elektrik alan altında sürüklenmesi ve difüzyonu $Fe_i^+B_s^-$ çiftlerinin ayrışma kinetiği tarafından kontrol edilir. Faz III'e göre ise 470K-520K sıcaklık aralığında hem Fe_i^+ hem de $Fe_i^+B_s^-$ çiftlerinin sayısı azalır. Bu durumda $Fe_i^+B_s^-$ çiftleri ayrışır ve bu sıcaklıklarda termal olarak aktif olan deşiklerin Fe_i^+ tarafından yayınlanmasıyla demir nötr yük (Fe_i^0) durumuna geçer.

Yukarıda anlatılan süreçleri daha iyi anlamak için, bu süreçleri model çerçevesinde ele almak ve bu modeli betimleyen diferansiyel denklemleri belli başlangıç ve sınır koşulları altında çözmek gerekir. Burada betimlenecek model, bir Schottky diyotunun deplasyon bölgesinde sürüklenme-difüzyon denkleminin belirli varsayımlar, belirli sınır ve başlangıç koşulları altında çözülmesine dayanmaktadır. Yukarıdaki süreçleri betimleyecek sürüklenme difüzyon denklemi aşağıdaki varsayımları sağlamalıdır:

- a) Difüzyon süresince toplam demir konsantrasyonu sabit kalır.
- b) Difüzyon daha önce boşaltılmış olan bölgeye doğru olur [40].
- c) Difüzyon katsayısı sıcaklığa bağlıdır ve konumdan bağımsızdır.
- d) Akseptör konsantrasyonu dağılımı tekdüzedir, böylece bulkin içinde elektrik alanı $E(x) = E_M(1 - e/W)$ lineer formunda olur.
- e) Difüzyon katsayısı ve iyon mobilitesi arasında $(D/\mu) = (k_B T/q)$, Einstein bağıntısı geçerlidir. Böylece katkılanan donör atomları bir seyreltik çözeltideki çözünen atomları gibi ele alınabilir.
- f) Demir-boron çiftlerinin ayrışması sıcaklığa bağlıdır.
- g) Birincil taşıyıcılar ile demir iyonları aynı işaretli yüke sahiptirler, böylece arkaplan katkısı üniform kalır.
- h) İkincil taşıyıcılar ve diğer safsızlıkların konsantrasyonları ihmal edilecek kadar küçüktür.
- i) Örneğin deplasyon bölgesinin her iki sınırında da hareketli demir akısı sıfırdır.

İlk varsayım 470K sıcaklığa kadar geçerlidir, çünkü Faz III'de demir nötr yük durumuna geçmekle beraber bu sıcaklıklarda demir atomları deplasyon bölgesinin

dışına yani nötral bölgeye termal olarak difüze olurlar [42, 43] ve Faz IV’de demir çökelekler oluşturur; dolayısıyla demir konsantrasyonu bu sıcaklıklarda korunmaz. (e) katkılanmış kusurların bir seyreltik çözelti oluşturduklarını garantiler.

Yukarıdaki varsayımlar ve katkılanmış iyonların bir seyreltik çözelti oluşturdukları varsayılarak, sistemi betimleyen diferansiyel denklemler aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$N_{Fe}(x, t) = N(x, t) + P(x, t) \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} + \mu N(x, t) \frac{\partial V(x, t)}{\partial x} \right] - \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = 4\pi R_c D N(x, t) [N_t - P(x, t)] - \nu P(x, t) \quad (3.21)$$

$$E(x, t) = \frac{\partial V(x, t)}{\partial x} = E_m \left(1 - \frac{x}{w} \right) \quad (3.22)$$

Burada, $N_{Fe}(x, t)$, $N(x, t)$, $P(x, t)$ ve N_t sırasıyla toplam demir, çift yapmayan ve pozitif yüklü (Fe_i^+) demir, akseptörlerle çift yapan demir ve toplam katkı konsantrasyonunu göstermektedirler. $V(x, t)$ potansiyel dağılımını, E_m deplasyon bölgesinde oluşan maksimum elektrik alan değerini, ν demir akseptör çiftlerinin ayrılma hızı, ϵ_s yarı-iletkenin di-elektrik sabitini, L numunenin kalınlığını, $N_{Fe}(L)$ zamandan bağımsız varsayılan [36] numunenin arka kısmının konsantrasyonunu temsil etmektedirler. Denklem (3.20) pozitif yüklü demirin dağılımının elektrik alan altında sürüklenmesini ve difüzyonunu betimler; denklemde donör-akseptör çiftlerini hesaba katmak için bir rekombinasyon terimi eklenmiştir. Denklem (3.20)’de köşeli parantez içindeki ikinci terim, elektrik alan altında sürüklenme terimidir ve deneyin geri difüzyon kısmında diyota uygulanan ters gerilim kaldırıldığından, iyonların elektrik alan altında sürüklenmeleri ihmal edilebilir. Denklem (3.21) demir-boron çiftlerinin konsantrasyonunun zamana göre değişimini betimler. Denklem (3.22) ise yarı-iletken içinde elektrik alanın derinliğe bağlı olarak lineer azaldığını gösterir. Yukarıdaki bağlaşıklık denklemlerin analitik çözümleri mümkün değildir. Bu nedenle ancak nümerik olarak çözümlenip, simüle edilebilirler.

TID’de veri toplama, V_{puls} , düzlenme geriliminden (sıfır alınabilir) V_r ters gerilimine geçildiği anda başlanır. Bu, TID zaman skalasının orijiniidir. TIDIF yönteminde ise veri toplamasına V_r ters geriliminden V_{puls} düzlenme gerilimine geçildiğinde başlanır; bu

nokta TIDIF zaman skalasının orijini ve aynı zamanda TID zaman skalasının bitimidir. Tam bu anda deplasyon bölgesi, uygulanan V_r ters geriliminden dolayı en büyük değerindedir. Eğer V_r ters gerilimi yeterince uzun bir süre uygulanırsa, genişleyen deplasyon bölgesi içinde kalan pozitif yüklü demir atomlarının hemen hemen tamamı deplasyon bölgesinin sınırında birikirler ve boşaltılmış bölgenin içinde ihmal edilebilir sayıda pozitif yüklü demir atomu kalır. Dolayısıyla başlangıçta pozitif demir için aşağıdaki dağılım öngörülebilir:

$$N(x < W_r, 0) = 0, \quad N(x > W_r, 0) = N_0 \quad (3.23)$$

W_r , V_r ters gerilimi altında deplasyon bölgesinin sınırının değeridir, N_0 toplam demir atomlarının ortalama yoğunluğu ve δx deplasyon bölgesi sınırından sonsuz küçük uzaklıktır. TIDIF zaman skalasının sonunda, yani V_{pulse} geriliminden V_r ters gerilimine tekrar geçildiğinde daha önce boşaltılmış bölgeye demir atomları termal difüzyon ile tekrar dağılırlar. Eğer puls süresi yeterince uzun ise sistem durağan duruma gelir ve nötral bölgede demir-boron çift reaksiyonu dengeye ulaşır. Bu durumda yine V_{pulse} altındaki deplasyon bölgesinde ihmal edilebilir sayıda demir atomu olabilir. Bu durumda, toplam demir yoğunluğu için aşağıdaki ifade yazılabilir:

$$N_{Fe}(x < W_{pulse}, 0) = 0, \quad N_{Fe}(x > W_{pulse},) = N_{Sol} \quad (3.24)$$

W_{pulse} , V_{pulse} altında deplasyon bölgesinin sınırı, t_∞ TID zaman skalasının sonu ve N_{Sol} silikon içinde çözülmüş toplan demir yoğunluğudur.

İyon dağılımı Schottky diyotunun uzay yükü bölgesini etkiler, dolayısıyla deplasyon bölgesinin kapasitesinde bir değişime yola açar [36]. Bu kapasite değişimi DLTS deneylerindeki kapasite değişimine benzer şekilde hesaplanabilir. Serbest taşıyıcı konsantrasyonuna göre ihmal edilebilir derin tuzak konsantrasyonu için bir DLTS deneyinde ΔC kapasite geçişinin genliği

$$\frac{\Delta C}{C(\infty)} \approx -\frac{1}{W^2} \int_0^W \rho(x, t) \frac{x}{N_D} dx \quad (3.25)$$

ile verilir [44]. Burada N_D donör (boron) konsantrasyonu, $C(\infty)$ durağan durumdaki ($t = \infty$ 'daki) kapasite değeridir ve $\rho(x, t)$ uzay yükü yoğunluğudur ve aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$\rho(x, t) = q[N_{Fe}(x, t) - N_t] \quad (3.26)$$

Bu denklemler yukarıda belirtilen varsayımlar ışığında yine yukarıda belirtilen sınır ve başlangıç koşulları altında uygulanan V_r ters gerilimi ve sinyalin uygulama zamanı gibi deneysel parametreler dikkate alınarak nümerik olarak çözülecek ve çözümleri simüle edilecektir.

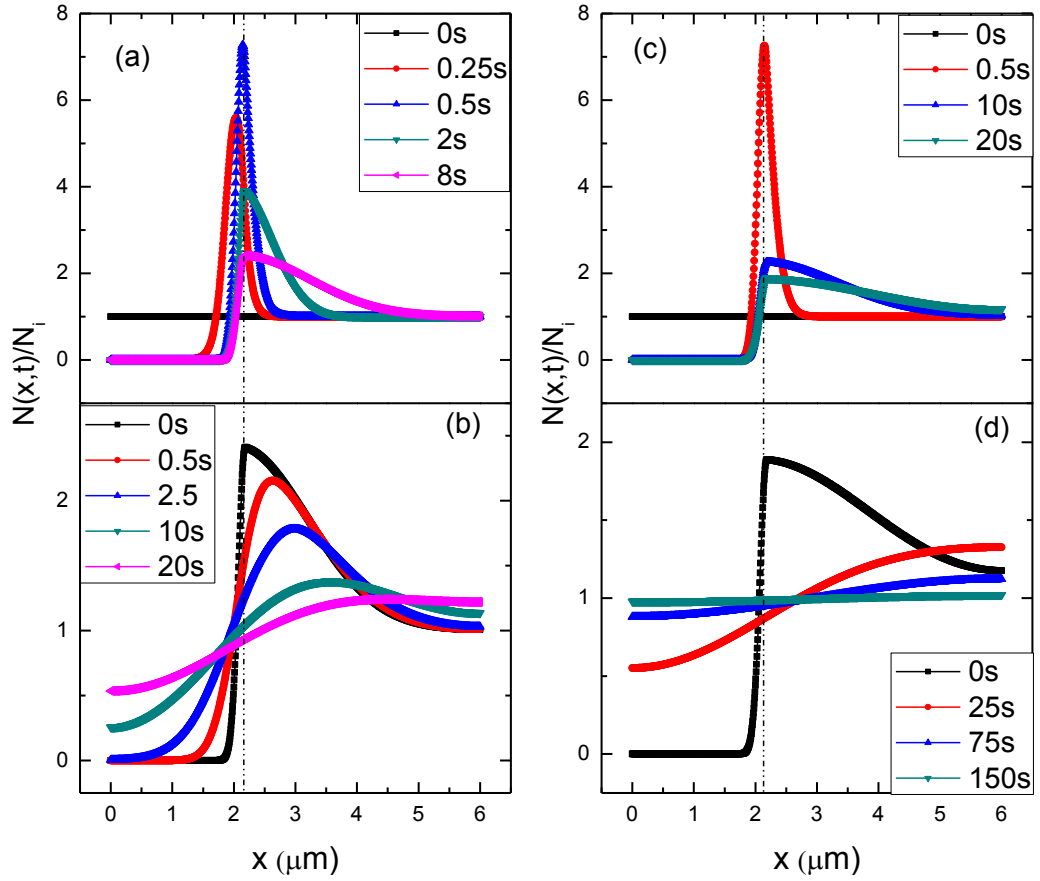
3.3.2. Diferansiyel Denklemlerin Nümerik Çözümleri

3.3.2.1. Konsantrasyon-Derinlik Profili

Yukarıda yapılan varsayımlar, sınır ve başlangıç koşulları kullanılarak, (3.19), (3.20), (3.21) ve (3.22) denklemlerinin nümerik çözümleri yapılarak sürüklenme ve tekrar geriye doğru difüzyon profilleri elde edildi. Bu çözümlerde difüzyon katsayısı için $D = D_0 \exp(-E_m/k_B T)$, ayrışma hızı için $v = v_0 \exp(-E_d/k_B T)$, yakalanma yarıçapı için $R_C = q^2/(4\pi\epsilon\epsilon_0 k_B T)$ ve deplasyon bölgesi genişliği için $W = \sqrt{2\epsilon\epsilon_0(V_m - V_b)/qN_t}$ ifadeleri kullanıldı ve çözümlerde kullanılan parametreler, her çözüm için ayrı ayrı tablolarda belirtilmektedir. Ayrıca diyotun oluşum gerilimi, V_b (built in voltage) sıfıra set edildi, yani başlangıçta derinlik sıfır alındı; bu nedenle iyon dağılımının derinliğe göre değişimi $x=0$ 'dan başlayacaktır. Şekil 3.3.1'de Tablo (3.1)'deki parametreler kullanılarak 420K sıcaklığı için (3.20), (3.21) ve (3.22) denklemlerinin çözümü ile elde edilen demir-boron çiftleri ve demir iyonlarının dağılımının derinliğe göre değişimi görülmektedir. Şekil 3.3.1(a) farklı zamanlar için 7.4V ters gerilim altında iyonların sürüklenmesi sonucu toplam demir (demir-boron çiftleri ve demir iyonlarının toplamı) dağılımının değişimini gösteriyor. İyonlar 0.5 saniyede deplasyon bölgesinin kenarına birikirler ve zaman arttıkça deplasyon bölgesinin dışına difüze olurlar. Şekil 3.3.1(b)'de ise 7.4V ters gerilim altında sürüklenen iyonların ters gerilim kaldırıldığında geriye difüze olmaları sonucunda toplam demir dağılımının değişimini gösteriyor. Burada başlangıç dağılımı olarak Şekil 3.3.1(a)'nın 8. saniyedeki dağılımı (TID zaman skalası için t_∞ zamanı) alınmıştır. Zaman arttıkça geriye doğru artan bir iyon dağılımı görülüyor fakat iyon dağılımının başlangıçtaki durumuna gelmesi uzun zaman gerektiriyor. Şekil 3.3.1(c) ve Şekil 3.3.1(d) yine aynı parametreler kullanılarak elde edildi, fakat bu iki grafikte sürüklenme ve difüzyon süreleri farklıdır. Şekil 3.3.1(d)'de görüldüğü gibi 150 saniye sonra iyon dağılımı, yaklaşık olarak başlangıç iyon dağılımına ulaşıyor.

Tablo 3.1: Demirin konsantrasyon dağılımını ve buna karşılık gelen kapasite geçişlerini hesap etmek için kullanılan parametreler.

Parametre	$N_t \approx N_A$ (cm^{-3})	N_L (cm^{-3})	$V_r = V_m$ (V)	D_0 (cm^2/s)	v_0 (s^{-1})	E_m (eV)	E_d (eV)
Değeri	2×10^{15}	5×10^{14}	7.4	2.5×10^{-2}	5.78×10^{15}	0.63	1.18

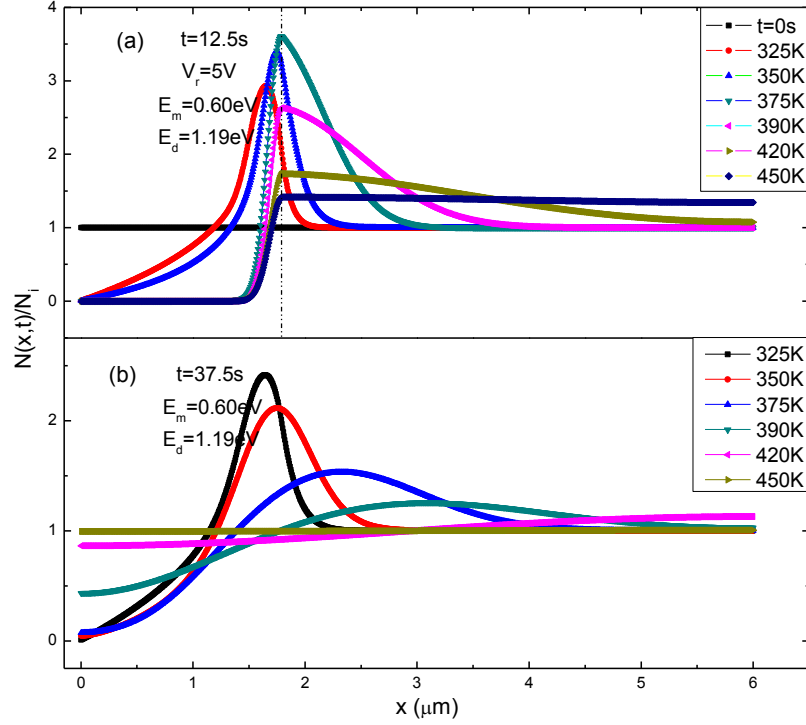


Şekil 3.3 1: Toplam demir derinlik profili: (a) ve (c) 420K sıcaklığında 7.4V ters gerilim altında farklı sürüklenme periyotlarına karşılık gelen demir-boron çiftleri ve demir iyonları toplamının derinliğe bağlı dağılımını göstermektedir. (b) ve (d) ise uygulanan ters gerilim kaldırıldığında sırasıyla (a) ve (c) ye karşılık gelen toplam geri difüzyon-derinlik profilidir. Çizgi nokta ile gösterilen dikey doğru deplasyon bölgesinin sınırını belirtmektedir.

Bölüm 2.2’de anlatıldığı gibi 300K-370K sıcaklık aralığında pozitif yüklü demir difüze olurken ortamdaki boron iyonlarına bağlanır, bu nedenle demirin sürüklenmesini bu

sıcaklık aralığında gözlemek mümkün değildir. Yapılan nümerik çözümler bu sıcaklık aralığında toplam demir dağılımı-derinlik profilinde çok küçük bir değişim olduğunu göstermektedir. $E_m = 0.60\text{eV}$, $E_d = 1.19\text{eV}$ ve $V_r = 5\text{V}$ ve diğer parametreler Tablo 3.1'den alınarak farklı sıcaklıklarda demir iyonu dağılımı için yapılan çözümler Şekil 3.3.2'de verilmektedir. Şekil 3.3.2(a)'da 12.5 saniyelik ters gerilim pulsu altında demir iyonlarının farklı sıcaklıklardaki dağılımı görülmektedir. Burada 325K ve 350K sıcaklıklarında demir iyonlarının deplasyon bölgesinin sonuna birikmedikleri görülüyor, ancak 375K civarında demir iyonları deplasyon bölgesinin sonuna birikebiliyorlar. 450K'de ise iyonların deplasyon bölgesinin dışına difüze oldukları görülüyor. Şekil 3.3.2(b) ise 12.5 saniyelik ters gerilim pulsunun kaldırılmasının ardından gelen 37.5 saniyelik geriye difüzyon sürecidir. Burada Şekil 3.3.2(a)'da 325K ve 350K dağılımlarında deplasyon bölgesinin sonuna kadar gidemeyecek kadar yavaş olan ve boron iyonlarına yakalanan demir iyonları yine geriye difüze olamayacak kadar yavaşlar. Geriye difüzyon yine 375K sıcaklığında mümkün olmaya başlıyor. 420K'de iyon dağılımı başlangıç dağılımına %90-95 oranında yaklaşmaktadır ve 450K'de başlangıç dağılımı hemen hemen sağlanır. 450K sıcaklığında başlangıç dağılımının tam sağlanamamasında deplasyon bölgesinin dışına çok fazla iyonun difüze olmasının katkısı vardır. Şekil 3.3.2(a) ve Şekil 3.3.2(b)'deki durumlar Bölüm 2.2'de anlatılan 3 fazlı difüzyon mekanizmasını tam olarak açıklıyor.

Demir-boron çiftlerinin ayrışması keskin bir şekilde sıcaklığa bağlıdır [13, 14, 22]. Şekil 3.3.2 demir-boron çiftlerinin oluşumunun ve tekrar ayrışmalarının sıcaklığa bağlılığını gösteriyor. Bölüm 2.2'de I. Faz'da anlatıldığı gibi 1370K sıcaklığa kadar çift sayısı artar ve serbest demir sayısı azalır. Şekil 3.3.2(a)'da 325K, 350K sıcaklıklarında sürüklenen demir iyonlarının olduğu görülüyor fakat bunlar deplasyon bölgesinin sınırına birikecek kadar zaman bulamazlar ve ortamdaki boron iyonlarına bağlanırlar. Şekil 3.3.2(b)'de görüldüğü gibi bu sıcaklıklarda geri difüzyon hemen hemen hiç yoktur. Bu, hareket eden demir iyonlarının yakalandığını göstermektedir. 375K sıcaklığında ise iyonların sürüklenmeleri ve sürüklenen iyonların geri difüze olmaları açıkça gözleniyor.



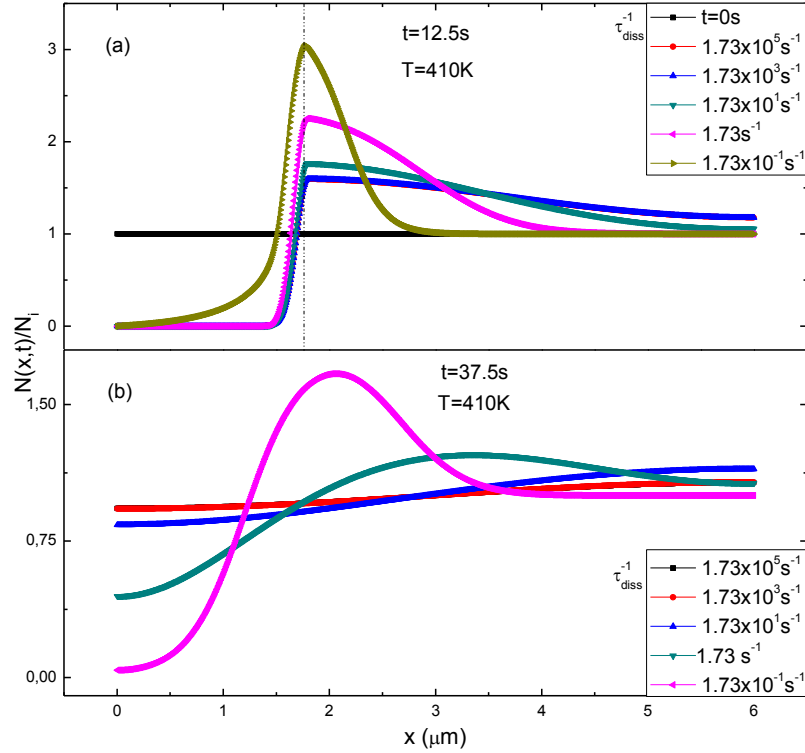
Şekil 3.3.2: Toplam demir profilinin sıcaklıkla değişimi: (a) 12.5 saniyelik periyoda sahip 5V ters gerilim altında farklı sıcaklıklarda demir iyonlarının sürüklenmesi sonucu toplam demir konsantrasyonunun dağılımı. ($t=0$ demir iyonlarının başlangıç dağılımıdır). (b) ters gerilim pulsu altında sürüklenen iyonlarının aynı sıcaklıklarda geri difüzyonu. Difüzyon periyodu 37.5 saniyedir. Çizgi nokta ile gösterilen dikey doğru deplasyon bölgesinin sınırını belirtiyor. Çözüm ile ilgili şekil üzerinde gösterilmeyen parametreler Tablo 3.3.1’de verilmektedir.

Demir-boron çiftlerini ayrışmasını betimleyen önemli bir parametre de ayrışma sabitidir. Ayrışma sabitinin demir dağılımına etkisini hesaplarken yine deney verileri göz önüne alındı. Tablo 3.2’deki parametreler kullanılarak 410K’de farklı v değerleri için yapılan çözümler Şekil 3.3.3’de verilmektedir. Şekil 3.3.3(a)’da 12.5 saniyelik periyoda sahip 5V’luk ters gerilim altında demir iyonlarının, demir-boron çiftlerinin ayrışma sabitinin 10s^{-1} mertebesinde küçük olduğunda deplasyon bölgesinde sürüklenmelerinin sıcaklık 410K olduğunda dahi çok az olduğu görülüyor. Ayrışma sabitinin $10^3 - 10^5\text{s}^{-1}$ mertebelerinde ise 410K sıcaklığında tüm demir iyonları serbesttir ve ters gerilim altında konsantrasyon dağılımı-derinlik profili hemen hemen aynıdır. Şekil 3.3.3(b) ise 410K’de ters gerilimin kaldırılmasıyla başlayan 37.5 saniyelik periyoda sahip geri difüzyon pulsudur. Burada demir-boron ayrışma sabiti 1.73s^{-1} alındığında geri difüzyonun meydana geldiği görülürken 0.173s^{-1} alındığında ise geri difüzyonun olmadığı görülüyor. Oysa 4. Bölüm’de görüleceği gibi deneysel verilerde

410K sıcaklığında silikon içinde demir tamamen serbest olduğundan (Bölüm 2.2, II. Faz) ters gerilim altında deplasyon bölgesinde demir iyonlarının sürüklenmesi ve geri difüzyonu süreçleri açık bir şekilde gözlemleniyor.

Tablo 3.2: Şekil 3.3.3 çözümleri için parametreler.

Parametre	$N_t \approx N_A$ (cm^{-3})	N_L (cm^{-3})	$V_r = V_m$ (V)	D_0 (cm^2/s)	E_m (eV)	E_d (eV)
Değeri	2×10^{15}	5×10^{14}	5	2.7×10^{-2}	0.63	1.19



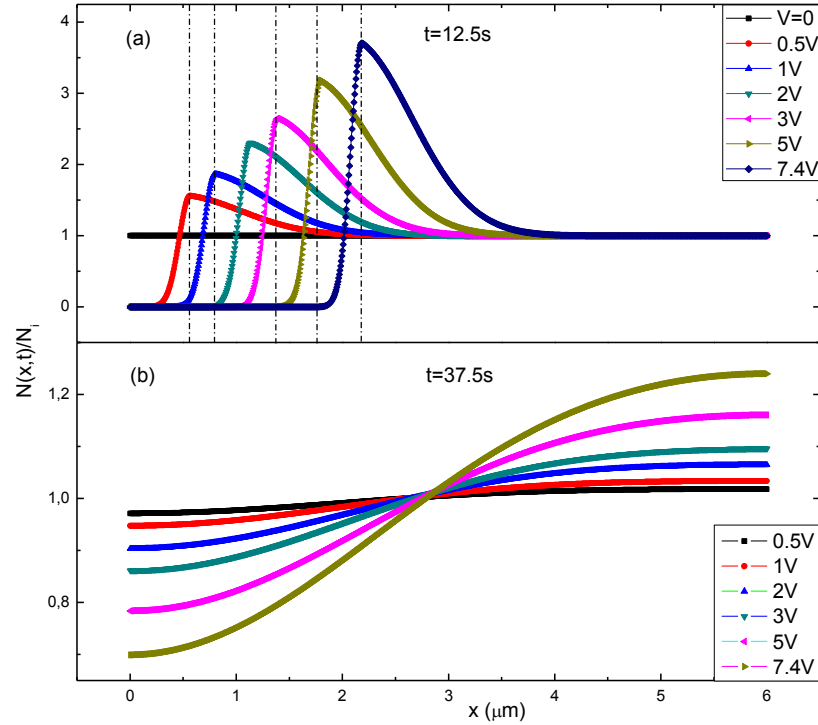
Şekil 3.3.3: Demir konsantrasyon dağılımı-derinlik profilinin demir-boron çiftinin ayrışma sabitine bağlılığı: (a) 410K’de 12.5 saniyelik periyoda sahip 5V ters gerilim altında farklı demir-boron ayrışma sabitleri için toplam demir konsantrasyonu dağılımı- derinlik profili. (b) 5V ters gerilim pulsunun kaldırılması sonrasında gelen 37.5 saniyelik geri difüzyon periyodu. Çözümle ilgili parametreler Tablo 3.2’de verilmektedir. Çizgi nokta ile gösterilen dikey doğru deplasyon bölgesinin sınırını belirtmektedir.

Konsantrasyon profili, uygulanan ters gerilimin genliğine bağlı olarak değişir. Uygulanan ters gerilimin genliğinin büyüklüğü deplasyon bölgesinin ne kadar genişlediğini gösterir. Sabit bir zaman dilimi için deplasyon bölgesi ne kadar çok genişlerse, içinde kalan demir atomları sayısı da o kadar fazla olur ve dolayısıyla

sürüklenen demir iyonları miktarı da aynı oranda fazla olur. Demir konsantrasyonu dağılımı-derinlik profilinin uygulanan ters gerilimle değişimi Şekil 3.3.4'de verilmektedir.

Tablo 3.3: Şekil 3.3.4 çözümleri için parametreler.

Parametre	$N_t \approx N_A$ (cm^{-3})	N_L (cm^{-3})	ν_0 (s^{-1})	D_0 (cm^2/s)	E_m (eV)	E_d (eV)	Sıcaklık (K)
Değeri	2×10^{15}	5×10^{14}	1.7×10^{17}	2.7×10^{-2}	0.58	1.19	390



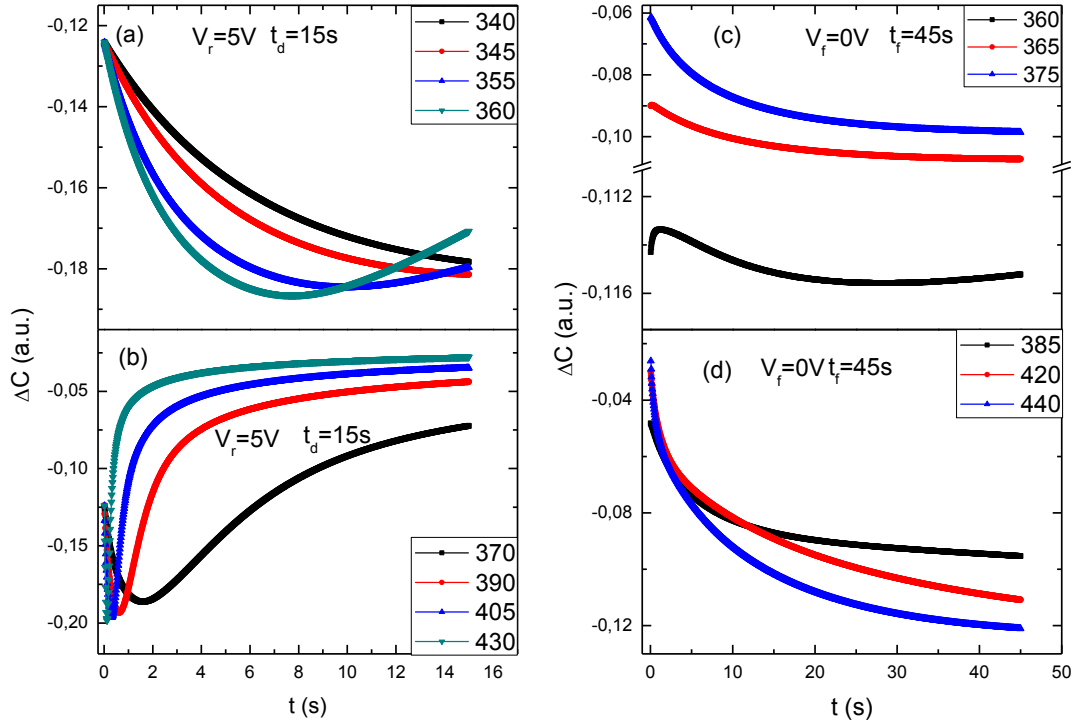
Şekil 3.3.4: Toplam demir konsantrasyonu dağılımı-derinlik profilinin uygulanan ters gerilime göre değişimi: (a) 12.5 saniyelik periyoda sahip farklı büyüklüklerdeki ters gerilimler altında toplam demir konsantrasyonu dağılımı. (b) (a)'da verilen ters gerilimler kaldırıldığında 37.5 saniyelik geri difüzyon periyodu boyunca toplam demir konsantrasyonu dağılımı. Bu çözümlerle ilgili parametreler Tablo 3.3'de verilmektedir. (a)'da çizgi-nokta ile gösterilen düşey doğrular farklı gerilim değerlerine karşılık gelen deplasyon bölgelerinin sınırlarını göstermektedirler.

Şekil 3.3.4(a) farklı ters gerilimler altında 390K sıcaklığında konsantrasyon dağılımı-derinlik profilini göstermektedir. Bu dağılımlar aynı zamanda Şekil 3.3.4(b)'de verilen geri difüzyon konsantrasyon dağılımı-derinlik profiline karşılık gelen dağılım (karşılık

gelen gerilim etiketi) için başlangıç verileridir. 37.5 saniyelik geri difüzyon periyoduna bakıldığında 7.4V ters gerilim altında sürüklenen demir iyonlarının geri difüzyonu en azdır ve 0.5V ters gerilim altında sürüklenen iyonlar hemen hemen başlangıç dağılımını almışlardır. Deplasyon bölgesinin genişliği artıkça sürüklenen iyonların boşalttıkları bölgeye geri gelmeleri daha uzun bir süre gerektiriyor; dolayısıyla büyük genliğe sahip ters gerilimler altında sürüklenen iyonların geri difüzyon sonucu başlangıç dağılımını almaları için daha uzun zaman beklemek gerekir.

3.3.2.2. Kapasite Geçişleri

Yukarıda gösterilen (3.19), (3.20), (3.21) ve (3.22) denklemlerinin nümerik çözümleri, bir Schottky diyotunun deplasyon bölgesinin yük dağılımında bir değişimin meydana geldiğini göstermektedirler. Bu çözümlerden elde edilen konsantrasyon dağılımları kullanılarak diyotun kapasitesindeki zamana bağlı değişimler (3.25) ve (3.26) eşitlikleri vasıtasıyla hesap edildi. Şekil 3.3.5, Tablo 3.2'deki parametrelerle yapılan çözümler sonucunda elde edildi. Şekil 3.3.5(a) ve Şekil 3.3.5(b) farklı sıcaklıklarda 15 saniyelik periyoda sahip 5V ters gerilim altında sürüklenen demir iyonlarının neden olduğu kapasite geçişlerini gösteriyor. 340K ve 360K eğrilerindeki kapasite geçişleri azalan üstellerdir. Bu durum deplasyon bölgesinin daralmasına karşılık gelir, fakat gerçekte deplasyon bölgesi genişliyor. Bu geçişler, demir iyonlarının çoğunun boron ile çift yapmış olmasından dolayı ortamdaki serbest demir iyonlarının az olması, hızlarının düşük olması ve demir iyonları difüze olurlarken boron iyonlarına yakalanmasından kaynaklanır. Eğer daha uzun bir süre ters gerilim uygulanırsa, deplasyon bölgesinin sonuna serbest demir iyonları birikecek ve kapasitedeki azalma, artmaya dönüşecektir. Şekil 3.3.2 (a)'da sıcaklığa bağlı demir konsantrasyonu dağılımı-derinlik profilinden görüldüğü gibi 370K'den küçük sıcaklıklarda demir iyonları deplasyon bölgesinin sonuna birikemiyorlar ve bu durum Şekil 3.3.5(a)'daki bahsi geçen sıcaklıklardaki kapasite geçişini verir. 360K'den sonra kapasite geçişleri beklenildiği gibi pozitif yönde üstel olarak artmaya başlıyor ve sıcaklığa bağlı olarak daha hızlı bir şekilde maksimumu değere ulaşıyorlar. Ayrıca ters gerilim periyodunun ilk anlarında (erken zamanlarında) ortaya çıkan, düşük sıcaklıklarda ters gerilim periyodunun önemli bir kısmını oluşturan ve üstel olarak azalan bir bileşen vardır. Bu bileşen sıcaklık arttıkça azalıyor ve yüksek sıcaklıklarda tükeniyor.



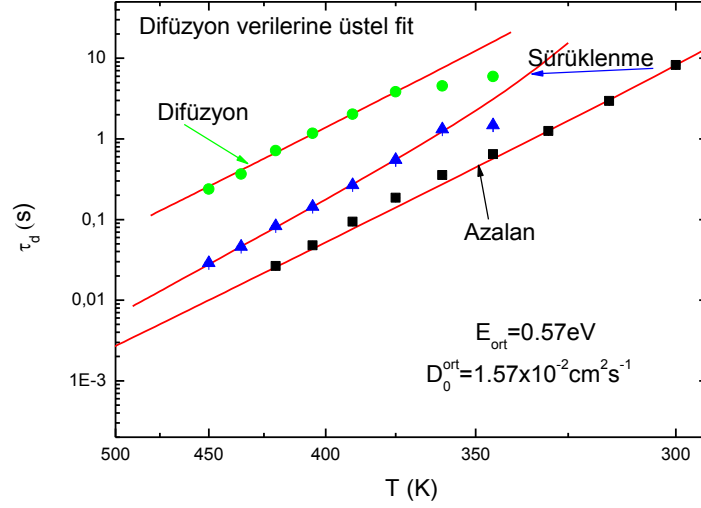
Şekil 3.3.5: Kapasite geçişleri: (a) ve (b) Farklı sıcaklıklarda ters gerilim altında demir iyonlarının sürüklenmesi sonucu meydana gelen kapasite geçişleri (TID sinyalleri). (c) ve (d) Farklı sıcaklıklarda uygulanan ters gerilimin kaldırılması sonucu iyonların geri difüzyonuna karşılık gelen kapasite geçişleri (TIDIF sinyalleri). Buradaki simülasyonlar, Tablo 3.2'deki parametreler kullanılarak elde edilmişlerdir.

Denklem (3.20)'de difüzyon ve çift oluşum terimleri ihmal edildiğinde, Denklem (3.3) elde edilir. Bölüm 3.2'de gösterildiği gibi bu denklemin çözümlerinde konsantrasyonun zamana göre değişimi üsteldir ve bu iyonların deplasyon bölgesi sonuna üstel artarak biriktiklerini gösterir. İyonların bu davranışı (3.11) eşitliğinde gösterilen üstel kapasite davranışını verir. Dolayısıyla ters gerilim periyodunun başlangıç kısmında görülen bu kapasite azalması Denklem (3.3)'de ihmal edilen terimlerden gelmelidir. Ters gerilim periyodunun erken zamanlarında kapasitede görülen bu üstel azalma iyonların deplasyon bölgesi içine yeniden dağılmaları ile açıklanabilir [41]. Denklem (3.25) deplasyon bölgesi içinde pozitif yüklü iyonların nötral bölgeye doğru yer değiştirmelerinin kapasitede bir azalmaya neden olduğu gösterir. Bir Schottky diyotu paralel plaka kapasite olarak düşünülün ve anlık olarak plakalar birbirinden hızla uzaklaştırılırsın. Plakaların birbirinden uzaklaşma hızları o denli yüksek olsun ki yüzeylerindeki yüklerin bir kısmı onlarla birlikte hareket edemesin. Bu durumda plakaların yüzeyindeki yük azalmış olacak ve kapasitede anlık olarak bir düşme meydana gelecektir. Schottky diyotuna ters gerilim uygulandığında deplasyon bölgesi

nötral bölgenin içine doğru hızla büyür ve daha önce nötral bölgenin içinde kalan pozitif yüklü iyonlar artan deplasyon bölgesinin sonuna hareket ederler. Bu durum erken zamanlarda kapasitenin düşmesine neden olur. Eğer iyonlar deplasyon bölgesinin genişlemesi ile aynı hızda hareket etselerdi erken zamanlardaki kapasite azalması gözlenmeyecekti. Nihayetinde DLTS sinyallerinde serbest taşıyıcıların sürüklenme hızları yayınlama hızlarından büyük olduğundan böyle bir kapasite azalması görülmemektedir [41]. Erken zamanlardaki bu kapasite azalması Referans [41]'de kapasite derinlik hassasiyeti olarak adlandırılmıştır. Burada bu adlandırmaya sadık kalınacaktır. Aşağıda Şekil 3.3.8'deki (Şekil 3.3.8(a)'nın içinde sürüklenmenin erken zamanlarına yapılan yakınlaştırma) simülasyonlarda gösterileceği gibi kapasite derinlik hassasiyeti uygulanan ters gerilimin büyüklüğüne bağlıdır. Büyük genliğe sahip ters gerilimler deplasyon bölgesinin daha çok genişlemesine ve daha fazla miktarda iyonun deplasyon bölgesinin sonuna birikmesine neden olurlar. Bu durum, deplasyon bölgesinin sonunda büyük bir konsatrasyon gradyenti oluşturur ve bundan dolayı deplasyon bölgesinin içine doğru iyon difüzyon akımı oluşur. Küçük genlikli ters gerilimlerde deplasyon bölgesinin genişlemesi uzay zaman yükü bölgesinin büyüklüğü ile karşılaştırılabilir (Şekil 3.3.4 (a)) ve bu kapasite derinlik hassasiyetinin genliğini küçültür. Tersine büyük genlikli ters gerilimler için sürüklenme periyodunun başlangıcında deplasyon bölgesinin sonuna biriken iyon miktarı ve deplasyon bölgesi içindeki iyon dağılımı arasındaki örtüşme ihmal edilebilir ve bu durum kapasitede görülen azalmanın genliğinin artmasına neden olur [41].

Şekil 3.3.6'da, Şekil 3.3.5(a) ve Şekil 3.3.5(b)'de bir kısmı gösterilen simülasyon verilerine üstel fit yapılması ile elde edilen TID zaman sabitlerinin sıcaklıkla değişimi gösteriliyor. Burada üç farklı üstel fonksiyona karşılık gelen üç farklı TID zaman sabiti τ_d mevcuttur. Bu zaman sabitleri verilerinden siyah renk karelerle gösterilen veriler ters gerilim pulsunun erken zamanlarında meydana gelen üstel azalmaya ait, mavi üçgenle gösterilen veriler sürüklenme ve yeşil toplarla gösterilen veriler periyodun son kısmına denk gelen ve deplasyon bölgesinin dışına doğru termal difüzyona ait verilerdir. Bu verilerin (3.18) ile verilen fonksiyona fit edilmesiyle demir için difüzyon enerji bariyeri ortalama (üç zaman sabiti için bulunan difüzyon enerji bariyerlerinin ortalaması) $E_m=0.57\text{eV}$ ve difüzyon katsayısı ön-üsteli için ortalama $D_0=1.57 \times 10^{-2} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ değeri elde

edilir. Difüzyon enerji bariyeri ve difüzyon katsayısı önüsteli için bulunan bu değerler Bulgular kısmında verilecek olan deneysel değerlerle uyum içindedir.



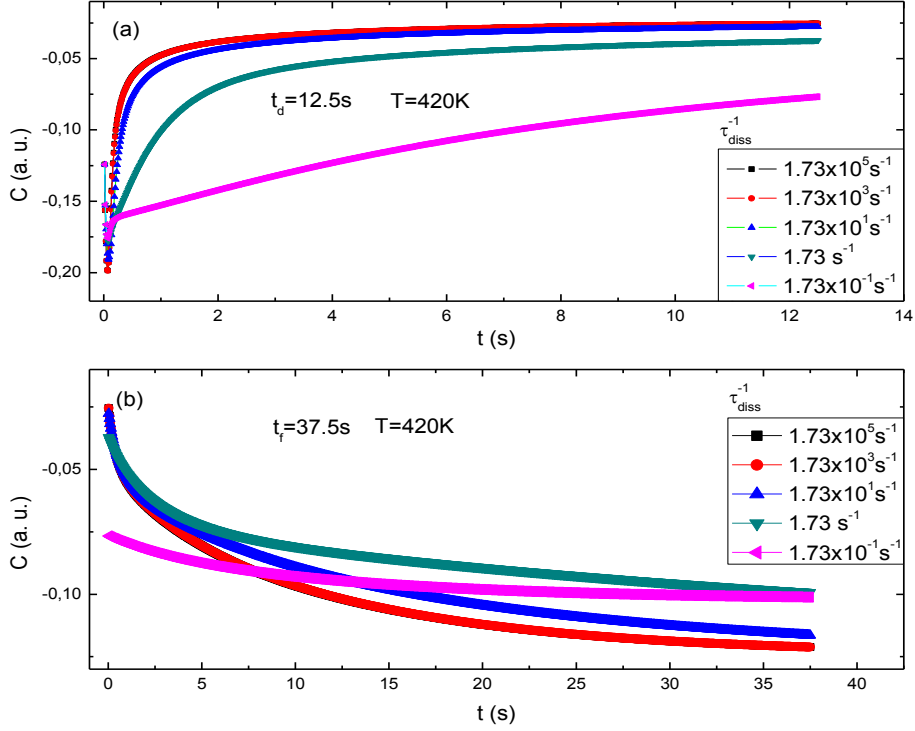
Şekil 3.3.6: TID zaman sabitinin (τ_d) sıcaklıkla değişimi: siyah renk karelerle gösterilen zaman sabiti verileri ters gerilim pulsunun erken zamanlarında meydana gelen üstel azalmaya, mavi üçgenle gösterilen veriler sürüklenme ve yeşil toplarla gösterilen veriler periyodun son kısmına denk gelen ve deplasyon bölgesinin dışına doğru termal difüzyona ait verilerdir. Şekil 3.3.5(a)'daki TID sinyallerinin 3 üstel fonksiyona fit edilmesi ile elde edilen TID zaman sabitlerinin sıcaklığa göre değişimlerinin büyüklükçe farklı olması üstlerinde belirtildiği gibi farklı süreçlere karşılık gelmelerinden kaynaklanmaktadır. τ_d eksenini log10 skalasında ve T eksenini $1/T$ skalasında.

Şekil 3.3.5(c) ve Şekil 3.3.5(d) 15 saniyelik ters gerilim periyodundan sonra gelen 45 saniyelik geri difüzyon periyodudur. Şekil 3.3.5(a), Şekil 3.3.5(b) ve Şekil 3.3.5(c), Şekil 3.3.5(d)'deki aynı sıcaklıklara sahip veriler birbirinin tamamlayanlarıdır; yani toplam puls, periyodun sürüklenme artı difüzyon kısımlarının toplamıdır. Böylece her bir sıcaklıktaki difüzyon verisi kendisine karşılık gelen sıcaklıktaki ters gerilim altında sürüklenme verisini başlangıç verisi olarak alır. Şekil 3.3.5(c)'de 355K'de kapasitede bir artış ve ardında bir düşme meydana gelmektedir. Bu artış başlangıç koşulundan kaynaklanmaktadır: bu sıcaklıklarda sürüklenme süresince yeterince beklenmediğinden deplasyon bölgesinin sonuna doğru yeterli miktarda pozitif demir birikmemiştir. Aynı sıcaklıklarda Şekil 3.3.5(a)'daki ters gerilim altında deplasyon bölgesinin sonuna birikecek kadar zaman bulamayan demir iyonları, ters gerilim kaldırıldığında ve deplasyon bölgesi tekrar daraldığında deplasyon bölgesinin sınırında kalarak ek bir yük

meydana getirirler ve bu kapasitede bir artışa neden olur. 360K'de demir iyonlarının geri difüzyonu sonucu meydana gelen kapasite geçişi açıkça gözlenmektedir ve daha yüksek sıcaklıklarda kapasite geçişleri giderek hızlanmaktadır. Bu durum 360K' civarında serbest demir iyonlarının sayısının arttığını ve ortamdaki boron atomuna yakalanmadan geri difüze olabilen serbest demir iyonlarının olduğunu gösterir. Şekil 3.3.2'de ve Şekil 3.3.5(b)'de 375K'de serbest demir iyonlarının artık deplasyon bölgesinin sonunda yeterince birikebildikleri görülüyor. Dolayısıyla Şekil 3.3.5(d)'de 375K'den ve daha yüksek sıcaklıklarda hızlanan ve genliği artan kapasite geçişleri hem serbest demir iyonlarının sayısının hem de demir iyonlarının geri difüzyonunun sıcaklıkla arttığını gösteriyor.

Demirin geri difüzyonu sıcaklığa bağlı olduğu kadar deplasyon bölgesinin sonuna biriken demir iyonlarının sayısına da bağlıdır. Deplasyon bölgesinin sonuna biriken iyon sayısının sıcaklığa, uygulanan ters gerilime ve demir-boron çiftlerinin ayrışmasına bağlı olarak değiştiği yukarıda demir konsantrasyonu dağılımı-derinlik profili çözümlerinde gösterildi. 420K sıcaklığında, Şekil 3.3.3'de gösterilen farklı τ_{diss}^{-1} , demir-boron çifti ayrışma oranlarına karşılık gelen demir konsantrasyonu dağılımı-derinlik verilerinin neden olduğu kapasite geçişleri Şekil 3.3.7' de gösterilmektedir. Bu kapasite geçişleri Şekil 3.3.3'deki verilerden elde edildiği için tamamen aynı parametreler (Tablo 3.2'deki parametreler) kullanılarak elde edildi. Şekil 3.3.7(a) 5V ters gerilim altında demir iyonlarının sürüklenmesi sonucu meydana gelen konsantrasyon dağılımının neden olduğu kapasite geçişlerini (TID sinyallerini) göstermektedir. Burada ayrışma zaman sabitinin artması ile TID sinyallerinin küçüldüğü görülmektedir. $\tau_{diss}^{-1} = 1.73 \times 10^5 s^{-1}$ ve $\tau_{diss}^{-1} = 1.73 \times 10^3 s^{-1}$ ayrışma hızları (boron-demir çifti ayrışma hızı) için demir-boron çiftlerinin hemen hemen hepsi ayrılmış olduğundan TID sinyalleri üst üste çakışmıştır. Düşük sıcaklıklarda ise yukarıda verilen iki ayrışma hızı için TID sinyalleri çok az farklıdır. Ayrışma hızı $\tau_{diss}^{-1} = 1.73 \times 10^{-1} s^{-1}$ için ise demir iyonlarının sürüklenmesi sonucu oluşan kapasite geçişi diğer ayrışma hızları için verilen kapasite geçişlerinden farklı olarak dengeye ulaşmamıştır. Bu durum $10^{-1} s^{-1}$ mertebedeki ayrışma sabiti için demir-boron çiftlerinin 420K gibi yüksek bir sıcaklıkta dahi tamamen ayrılmadıklarını gösteriyor, oysa bu sıcaklıkta demir tamamen serbest durumdadır [13, 14, 22]. Ayrışma hızı azaldıkça demir-boron iyonlarının çift yapmasından dolayı deplasyon bölgesi içinde serbest kalan demir iyonlarının dağılımı

üniform olur [36]. Bu durum TID sinyalinde başlangıçta görülen azalmanın ayrışma hızı azaldıkça yavaş yavaş kaybolmasına neden olur.

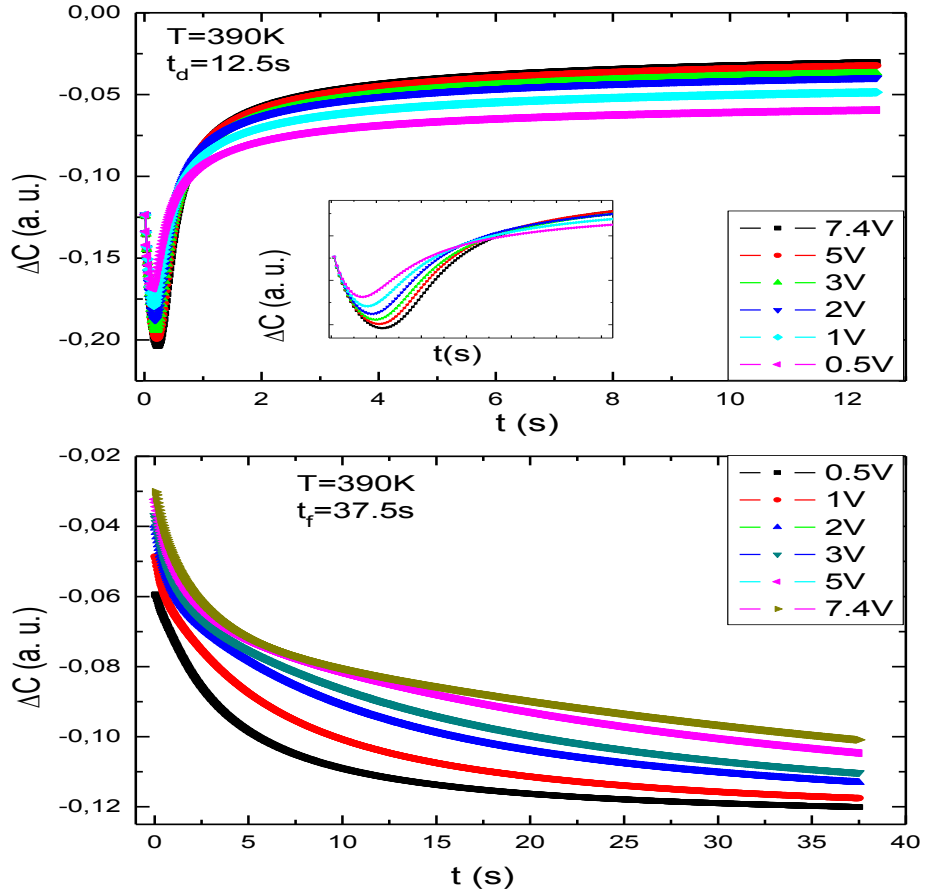


Şekil 3.3.7: TID ve TIDIF sinyallerinin demir-boron çifti ayrışma sabitine bağlılığı: (a) Ters gerilim altında demir iyonlarının sürüklenmesi sonucu meydana gelen kapasite geçişlerinin demir-boron çifti ayrışma sabitine bağlı olarak değişimi. Ters gerilim periyodu 12.5 s'dir. (b) Uygulanan ters gerilimin kaldırılması ile geri difüze olan demir iyonlarının neden olduğu kapasite geçişinin demir-boron çifti ayrışma sabitine bağlı olarak değişimi. Geri difüzyon periyodu 37.5 s'dir. (a) ve (b)'deki simülasyonlar Tablo 3.2'deki parametreler kullanılarak yapılmıştır.

Şekil 3.3.7(b)'de ters gerilim periyodundan sonra gelen geri difüzyon periyodunda iyonların geri difüzyonunun neden olduğu kapasite değişimi (TIDIF) sinyali görülmektedir. 10^5 - $10^3 s^{-1}$ mertebesindeki ayrışma oranları için demir iyonları ortamdaki boron iyonları ile çift oluşturmadığı için TIDIF sinyalleri TID sinyalleri gibi çakışıktır. Fakat ayrışma hızı küçüldükçe TIDIF sinyalleri de küçülmektedir. $1.73 \times 10^{-1} s^{-1}$ ayrışma hızına karşılık gelen TIDIF sinyali Şekil 3.3.7(a)'daki aynı ayrışma hızına karşılık gelen sinyalin ters gerilim kaldırıldıktan sonraki devamıdır ve kapasite değişimi şekildeki diğer kapasite değişimlerine göre daha küçüktür. Bunun nedeni burada çift oluşumunun daha güçlü olması, bunun sonucu olarak ters gerilim altında iyonların deplasyon bölgesinin sonuna birikmemeleri ve deplasyon bölgesinin sonuna doğru ilerleyen demir iyonları geri difüze olurken ortamdaki boron iyonları ile çift

oluşturmalarıdır. Şekil 3.3.7(a) ve Şekil 3.3.7(b)'deki sonuçlar demirin p-tipi silikon içindeki difüzyonunun çift oluşumuna bağlı olduğunu gösterir.

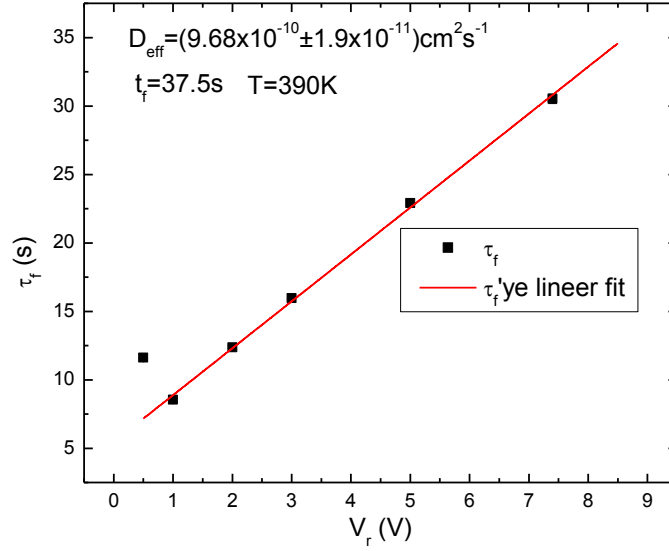
Uygulanan ters gerilimin TID ve TIDIF sinyallerine etkisi Tablo 3.3'deki parametreler kullanılarak elde edilen Şekil 3.3.8(a) ve Şekil 3.3.8(b)'de gösterilmektedir. Şekil 3.3.8(a)'da farklı ters gerilimler altında sürüklenen demir iyonlarının neden olduğu kapasite geçişleri gösterilmiştir. Şekil 3.3.4(a)'da görüldüğü gibi ters gerilim arttıkça deplasyon bölgesinin genişliği artar ve bu iyonların deplasyon bölgesinin dışına difüze olmalarını engeller; fakat büyük gerilim aynı zamanda iyonları hızlandırır, bu da dışa doğru difüzyonu artırır. Şekil 3.3.8(a)'da ters gerilim arttıkça kapasite geçişinin arttığı görülüyor, bu sürüklenen demir iyonlarının sayısının artmasından kaynaklanır. Aynı zamanda TID sinyalinin başlangıç kısmında bulunan üstel azalma da uygulanan ters gerilim küçüldükçe küçülmektedir, bu kapasite-derinlik hassaslığı ile açıklanabilir: Büyük bir ters gerilim uzay yükü bölgesinin sınırına büyük miktarda iyon sürükler ve bu sınırdaki kuvvetli bir konsantrasyon gerilimi oluşturur [36]. Uzay yükü bölgesi sınırındaki kuvvetli konsantrasyon gradyenti iyonların tekrar geri uzay yükü bölgesi içine dağılmalarına neden olan bir iyon difüzyon akımına neden olur [36]. Küçük ters gerilimler için uzay yükü bölgesi genişliği ters gerilim altında iyonların sürüklendiği katmanın genişliği ile karşılaştırılabilir ve bu kapasite-derinlik duyarlılığını azaltır [36]. Sürüklenme katmanı küçük olduğundan az miktarda iyon deplasyon bölgesinin sonuna birikmiştir ve bunlar geriye doğru küçük bir difüzyon akımı oluştururlar. Büyük ters gerilimler için sürüklenme sürecinin başlangıcı boyunca uzay yükü bölgesi içine doğru difüzyon, başlangıçtaki kapasite düşmesinin genliğini artırır. Şekil 3.3.8(b) sürüklenme periyodunun sonunda gelen geri difüzyon (TIDIF) periyodudur. Küçük ters gerilimler sonunda gelen geri difüzyondan kaynaklanan TIDIF sinyalleri daha küçüktür. Ters gerilim arttıkça TIDIF sinyalinin dengeye ulaşması daha uzun süre gerektiriyor. Nitekim 37.5 saniyeli geri difüzyon zamanı 0.5V ve 1V sinyallerinin dışındaki sinyallerin dengeye ulaşması için yeterli değildir. TIDIF zaman sabiti aşağıda (3.38) eşitliğinde gösterileceği gibi, W^2/D ile orantılıdır. W^2 uygulanan ters gerilim (V_r) ile orantılı olduğundan TIDIF zaman sabiti ters gerilimle doğru orantılıdır.



Şekil 3.3.8: TID ve TIDIF sinyallerinin uygulanan ters gerilime bağlı olarak değişimi: (a) Farklı ters gerilimler altında demir iyonlarının sürüklenmesi sonucu demir konsantrasyonu dağılımındaki değişimin neden olduğu kapasite geçişleri. (b) Uygulanan ters gerilimlerin kaldırılmasıyla demir iyonlarının geri difüze olmaları sonucunda demir konsantrasyonu dağılımında meydana gelen değişimin neden olduğu kapasite geçişleri. (a) ve (b) şekillerindeki aynı gerilim etiketine sahip sinyaller birbirlerinin devamlarıdır. Buradaki simülasyonlar Tablo 3.3'deki parametreler kullanılarak elde edildiler.

Şekil 3.3.8(b)'deki TIDIF sinyallerine iki üstel azalan fonksiyon fit edilerek TIDIF zaman sabitinin uygulanan ters gerilimle lineer olarak arttığı gösterildi. Şekil 3.3.9 uygulanan ters gerilime bağlı TIDIF sinyalinin üstel azalan fonksiyona fit edilmesi ile elde edilen TIDIF zaman sabiti-ters gerilim verilerini göstermektedir. Bu verilerin $\tau_f = W^2/\pi^2 D_{eff} = 2\epsilon\epsilon_0|V_b - V_r|/\pi^2 q N_A D_{eff}$ eğrisine sabit sıcaklıkta (390K) fit edilmesi ile efektif difüzyon katsayısı belirlenebilir. Burada W^2 yerine (3.8) eşitliğindeki karşılığı yazıldı. Burada efektif difüzyon sayısı sadece sıcaklığa bağlı olan bir parametredir. Diğer sabitlerin literatürde bilinen değerleri yazılır ve N_A için Tablo 3.3'deki değer kullanılırsa, yukarıdaki eşitlik $\tau_f = a + bV_r/D_{eff}$ doğrusuna dönüşür; a ve b uygun sabitlerdir. Şekil 3.3.8 (b)'deki simülasyon verilerine yapılan eksponansiyel

fitlerden elde edilen, Şekil 3.3.9'daki $\tau_f - V_r$ verilerinin bu doğruya fit edilmesi ile $D_{eff} = 9.68 \times 10^{-10} \mp 1.90 \times 10^{-11} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ bulunur. Bu Tablo 3.3'de verilen difüzyon enerjisi ve difüzyon ön-üsteli ile uyumlu bir sonuçtur.



Şekil 3.3.9: TIDIF (τ_f) zaman sabitinin uygulanan ters gerilime göre değişimi: Şekil 3.3.8 (b)'deki farklı gerilimlere karşılık gelen TIDIF sinyallerinin iki üstel fonksiyona fit edilmesi ile elde edilen TIDIF zaman sabiti uygulanan ters gerilim ile doğru orantılıdır.

Yukarıda anlatılan modeldeki denklemlerin nümerik çözümleri, TID ve TIDIF sinyallerini betimlerler; fakat deney sonuçlarından difüzyon katsayısı, difüzyon bariyeri gibi fiziksel parametreleri elde etmek için analitik terimler vermezler. Bu nedenle (3.20) ve (3.21) denklemlerinin belli yaklaşıklıklar altında analitik çözümlerini bulmak gerekir. Deneyde numuneye uygulanan ters gerilim kaldırıldığında deplasyon bölgesi sonuna birikmiş olan pozitif demir iyonlarının geriye difüze oldukları ve difüze olurlarken aynı zamanda negatif yüklü akseptörler (boron) tarafından tuzaklandıkları düşünülürse, Denklem (3.20)'deki sürüklenme terimi ihmal edilebilir ve

$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial N(x,t)}{\partial x} \right] - \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} \quad (3.27)$$

elde edilir. Bu denkleme analitik bir çözüm bulabilmek için Denklem (3.21), yani demir-boron çiftlerinin dinamiği için analitik bir çözüm bulmak gerekir. Zundel ve Weber [45] boron katkılanmış silikonda hidrojenin difüzyonu için (3.21) ve (3.27)

denklemleri ile aynı denklemlerden oluşan sistem için aşağıdaki varsayımlar altında analitik bir çözüm elde ettiler. Denklemler ve deney koşulları benzer olduğu için bu varsayımlar p-tipi silikonda demir difüzyonu için de önerilebilir:

- (i) $Fe_i^+ + B_s^- \rightleftharpoons (Fe_i^+ B_s^-)^0$ reaksiyonu dinamik dengeye ulaşmıştır, yani Denklem (3.14)'de $\partial P(x, t)/\partial t = 0$ olur. Bu varsayımda p-tipi silikon içinde sabit bir demir (pozitif yüklü ve boronla çift yapmış toplam demir) konsantrasyonu için tüm ölçüm sıcaklıklarında başlangıçta ($t = 0$) reaksiyonun dengeye ulaştığı kabul edilir.
- (ii) $v \gg 4\pi R_c DN_t(x, t)$. Bu varsayıma göre $t = 0$ 'da $(Fe_i^+ B_s^-)^0$ çiftlerinin konsantrasyonu her ölçüm sıcaklığı için Fe_i^+ konsantrasyonundan çok büyüktür.
- (iii) $4\pi R_c DN_t/v \gg 1$. Buna göre difüzyon süreci tamamen demir iyonunun boron tarafından tuzaklanması sürecine bağlıdır.

(i) ve (ii) varsayımları göz önüne alındığında Denklem (3.21)'den

$$P(x, t) \approx \frac{4\pi R_c DN_t N(x, t)}{v + 4\pi R_c DN_t} \approx \frac{4\pi R_c DN_t}{v} N(x, t) \quad (3.28)$$

bulunur. Bu ifade Denklem (3.27)'de yerine yazıldığında

$$\frac{\partial N(x, t)}{\partial t} = \frac{D}{1 + \frac{4\pi R_c DN_t}{v}} \frac{\partial^2 N(x, t)}{\partial x^2} = D_{eff} \frac{\partial^2 N(x, t)}{\partial x^2} \quad (3.29)$$

difüzyon denklemi elde edilir. Burada D_{eff} , efektif difüzyon katsayısı

$$D_{eff} = \frac{D}{1 + \frac{4\pi R_c DN_t}{v}} \quad (3.30)$$

biçiminde tanımlanır. (iii) varsayımı göz önüne alındığında Denklem (3.30)

$$D_{eff} \approx \frac{v}{4\pi R_c N_t} \quad (3.31)$$

olur. Bu ifadeye göre difüzyon süreci tamamen demirin boronda tuzaklanmasına (yakalanmasına) ve bu tuzaktan kurtulmasına (ayrışmasına) bağlıdır.

Denklem (3.29) Fick difüzyon denklemdir, çarpanlarına ayrıştırılarak çözülebilir ve genel çözümü

$$N(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} [A_m \sin(\lambda_m x) + B_m \cos(\lambda_m x)] \exp(-D_{eff} \lambda_m^2 t) \quad (3.32)$$

olarak bulunabilir. Burada λ_m ayrıştırma çarpanı, A_m ve B_m başlangıç ve sınır koşullarından bulunacak integrasyon çarpanlarıdır. (i) koşuluna göre

$$\left. \frac{\partial N(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial N(x,t)}{\partial x} \right|_{x=W} = 0 \quad (3.33)$$

ifadesi sağlanır. Bu ifadeden m bir tamsayı olmak üzere, $A_m = 0$, $\lambda_m = m\pi/W$ ve

$$N(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} B_m \cos\left(\frac{m\pi}{W}x\right) \exp\left(-\frac{(m\pi)^2 D_{eff}}{W^2}t\right) \quad (3.34)$$

elde edilir. Burada bilinmeyen B_m çarpanını bulmak için $t = 0$ 'da Denklem (3.34)'un her iki tarafını $\cos\left(\frac{n\pi}{W}x\right)$ ile çarpmak, deplasyon bölgesi üzerinden integralini almak ve $\int_0^W dx \cos(m\pi x/W) \cos(n\pi x/W) = (W/2)\delta_{mn}$ diklik bağıntısını kullanmak yeterlidir:

$$\int_0^W dx N(x,0) \cos\left(\frac{n\pi}{W}x\right) = \frac{W}{2} B_n \quad (3.35)$$

Bu ifadede sol taraftaki integrali alabilmek için şu varsayım kullanılabilir: Başlangıçta pozitif yüklü demir konsantrasyon gradyenti sonsuz küçük δ uzaklıkta fakat W deplasyon bölgesinin sınırı içindedir, yani başlangıçta $W - \delta$ bölgesi içinde pozitif yüklü demir bulunmamaktadır [40]. N_0 toplam demir iyonu konsantrasyonu olmak üzere $t = 0$ 'da $(W - \delta)N_0$ kadar demir iyonunun deplasyon bölgesini boşalttığı düşünülürse, deplasyon bölgesinin sonuna aynı miktarda demir iyonu toplanır. Başlangıçta deplasyon bölgesindeki hareketli demir iyonu konsantrasyonu N_i ise, $(W - \delta)N_0 = (N_i - N_0)\delta$ olur ve deplasyon bölgesi içinde başlangıçtaki hareketli demir iyonu konsantrasyonu $N_i = (W/\delta)N_0$ olarak bulunur. Bu sınırlar göz önüne alınarak (3.35) eşitliğindeki integral aşağıdaki gibi alınabilir [40]:

$$B_n = \frac{2}{W} \left[\int_0^{W-\delta} 0 dx \cos\left(\frac{n\pi}{W}x\right) + \int_{W-\delta}^W dx N_i \cos\left(\frac{n\pi}{W}x\right) \right] = \frac{2WN_0(-1)^n \sin\left(\frac{n\pi}{W}\delta\right)}{\delta n\pi}$$

Bu ifadede $\lim_{\delta \rightarrow 0} \sin(n\pi\delta/W) \rightarrow n\pi\delta/W$ limiti kullanılırsa $B_n \approx 2N_0(-1)^n$ olarak bulunur ve (3.34) ifadesi

$$N(x,t) = 2N_0 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \cos\left(\frac{n\pi}{W}x\right) \exp\left(-\frac{(n\pi)^2 D_{eff}}{W^2}t\right) \quad (3.36)$$

ifadesine dönüşür. Bu ifade difüze olan yüklü iyonların konsantrasyonunun zamana ve konuma göre değişimini verir. Bu yük dağılımının bir Schottky diyotunun kapasitesinde yol açtığı değişim Denklem (3.25)'den hesaplanabilir. Denklem (3.25)'de $\rho(x, t)$ yerine (3.36) eşitliğinin sağ tarafı yazılır ve integral alınırsa

$$\frac{\Delta C(t)}{C(\infty)} = \frac{C(t)-C(0)}{C(\infty)} = \frac{2N_0}{\pi^2 N_D} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} (1 - (-1)^n) \exp\left(-\frac{(n\pi)^2 D_{eff} t}{W^2}\right) \quad (3.37)$$

elde edilir; $C(0)$ başlangıçtaki ($t = 0$) kapasite değeridir. Bu eşitliğin sağ tarafı sonsuz terim içeren bir seri toplamdan oluşuyor ve bu haliyle çok kullanışlı değildir. Seri açıkça yazıldığında sadece n tek tamsayılarına karşılık gelen terimlerin kaldığı, kapasite değişimine en büyük katkının ilk terimden geldiği ve n^2 tam sayılarının üstel çarpanı hızla azalttığı görülür. Örneğin ilk terimin ikinci terime oranı $9 \exp(8\pi^2 D_{eff} t/W^2)$ 'dir. Bu oranda D_{eff} ve W 'nin oda sıcaklığındaki değerleri yerlerine yazıldığında saniye mertebesindeki zamanlar için dahi oran %95 civarındadır. Dolayısıyla yapılan deneyler göz önüne alındığında (3.37) eşitliğinde ilk terimi almak iyi bir yaklaşıktır. Bu durumda $N(x, t)$ konsantrasyonunun (veya ΔC kapasite geçişinin) e^{-1} oranına düşme zamanı olarak tanımlanan difüzyon zaman sabiti (düzlenme zaman sabiti) [46]

$$\tau_f = \frac{W^2}{\pi^2 D_{eff}} \quad (3.38)$$

olmak üzere (3.37) eşitliği

$$\Delta C(t) = C(\infty) \frac{4N_0}{\pi^2 N_D} \exp\left(-\frac{t}{\tau_f}\right) = \Delta C_M \exp\left(-\frac{t}{\tau_f}\right) \quad (3.39)$$

olur. (3.39) eşitliğindeki ΔC_M maksimum kapasite değişimi, (3.37) ifadesinden $n = 1$ değeri için $t \rightarrow \infty$ limitinde $\Delta C_M/C(\infty) = [C(\infty) - C(0)]/C(\infty) = 4N_0/\pi^2 N_D$ olarak bulunur.

Deneylerde Şekil 3.1.1'de gösterilen ters gerilim pulsu altında numunenin (p-tipi Schottky diyotunun) zamana bağlı kapasite geçişi (değişimi) belirli bir sıcaklık skalası (300K-475K) taranarak ölçülür. Bu kapasite geçişleri tek bir üstelden oluşur ve üstel geçişlerin zaman sabiti analiz edilerek numunede difüze olan iyonlara ait difüzyon katsayısı, difüzyon bariyeri gibi fiziksel nicelikler bulunur. Yukarıda anlatılan TIDIF modeli Şekil 3.1.1'de gösterilen pulsta gerilimin olmadığı, yani 1 ile işaretlenen kısma

ait kapasite deęişimi verilerinin davranışını betimler. Dolayısıyla (3.38) eşitlięi kullanılarak difüzyon katsayısı ve difüzyon bariyeri bulunacaktır. (3.30) ifadesi (3.38) eşitliğinde yazılırsa,

$$\tau_f = \frac{W^2}{\pi^2} \left(\frac{1}{D} + \frac{4\pi R_C N_t}{v} \right) = \frac{W^2}{\pi^2} \left(\frac{1}{D} + \frac{q^2 N_t}{\varepsilon \varepsilon_0 k_B v T} \right) = \frac{W^2}{\pi^2} \frac{1}{D} + \frac{W^2 N_t}{557 \pi^2 T} \tau_{diss} \quad (3.40)$$

elde edilir. Burada $\tau_{diss} = 1/v$ demir-boron çiftinin ayrışma zaman sabitidir ve çift yapan iyonlar arasındaki etkileşimin tamamen Coulombic olduğu varsayılarak yakalama yarıçapı için $R_C = q^2 / (4\pi \varepsilon \varepsilon_0 k_B T)$ kullanılmıştır. Bu ifadeye parantez içindeki ikinci terim hareketli demir iyonunun difüze olurken negatif akseptör tarafından tuzaklandığını gösterir. (3.31) ifadesi (3.38) eşitliğinde yerine yazılırsa

$$\tau_f = \frac{W^2 4\pi R_C N_t}{\pi^2 v} = \frac{q^2 W^2 N_t}{\pi^2 \varepsilon \varepsilon_0 k_B v T} = \frac{W^2 N_t}{557 \pi^2 T} \tau_{diss} \quad (3.41)$$

bulunur. Bu eşitliğe göre difüzyon zaman sabiti difüzyon katsayısından bağımsızdır ve difüzyon süreci tamamen demir iyonunun boron (veya başka kusurlar) tarafından tuzaklanmasına (yakalanmaya) ve iyonun bu tuzaktan kurtulmasına bağlıdır.

Deney verileri yukarıda anlatılan modele göre analiz edilerek difüzyon katsayısı ve difüzyon enerji bariyeri elde edilecektir. Bu model kullanılarak demir boron çiftlerinin ayrışma enerjisi ve ayrışma hızı v bulunabilir. Deney verilerinin analizine geçmeden önce deneyde kullanılan numuneler ve deneylerde verilerin nasıl toplandığının anlatılması analizlerin anlaşılmasını kolaylaştıracaktır.

3.4. NUMUNE HAZIRLAMAK İÇİN KULLANILAN CİHAZLAR

Numunelerin yüzeyleri iki şekilde fiziksel olarak aşındırıldı: Buehler marka taşıyıcı parlatici makine ile farklı granüllü elmas solüsyonlar veya alumina tozları kullanılarak ve cam üzerinde alumina tozu kullanarak elle örneklerin yüzeyleri aşındırıldı.

Numunelerin üzerine demir buharlaştırmak ve numunelere Schottky kontak yapmak için yüksek basınç çemberi (evaporatör) kullanıldı. Vakum çemberinde demir veya alüminyum buharlaştırmak için farklı tungsten flamanlar kullanıldı. Flamanlar 0.5mm kalınlığında tungsten telin ikiye katlanarak yay şeklinde bükülmesiyle yapıldılar, önce

asetonda daha sonra metil alkolde ultrasonik temizleyicide temizlendikten sonra 2×10^{-7} mbar basınçta yüksek akım geçirilerek degaz edilmesiyle hazırlandılar. Evaporatörde yüksek vakum turbo moleküler pompa ile sağlanmakta olup buharlaştırmadan önce basınç, 3×10^{-7} mbar'dan ve buharlaştırma süresince 5×10^{-6} mbar'dan küçüktür.

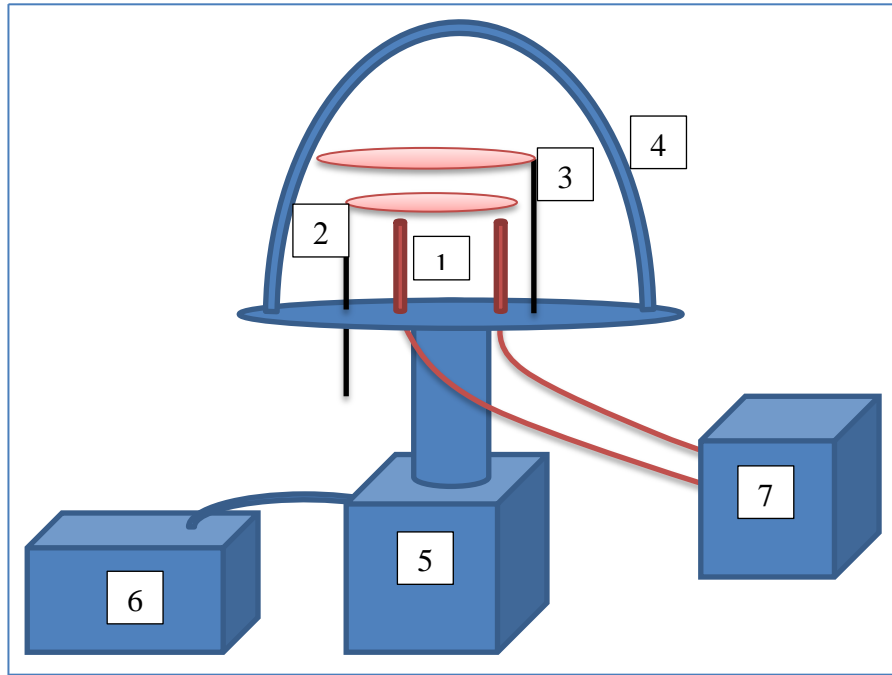
Numunelere difüzyon, 2070K sıcaklığa kadar çıkabilen yatay boru tipi fırın ile sağlanmaktadır. Fırının her iki ucuna yapılan aparatlarla yüksek sıcaklıkta difüzyon işlemi yapılırken, fırına verilen saf argon gazı satire edilerek örneklerin yüzeyinde oksitlenme önlenmektedir.

3.5. NUMUNE HAZIRLAMA

Deneyleerde float zone (FZ) yöntemi ile büyütülmüş 1×10^{14} - $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ mertebesinde boron katkılanmış p-tipi silikon pullar kullanıldı. Bu pulların bir kısmı laboratuvarında mevcut olup bir kısmı da 24204 numaralı BAP doktora tez projesinden alınmışlardır. Mevcut silikon pullardan 4 inç çapında olanların her iki yüzeyleri, 3 inç çapında olanların ise tek yüzeyleri asit çözeltisi ile aşındırılmış ayna parlaklığındadır. 1-1.5 inç çaplarına sahip olanların ise yüzeyleri asit çözeltisi ile aşındırılmamışlardır. Bu pullardan numune hazırlanırken yüzeyleri asit ile aşındırılmamış olanlar önce sırasıyla 5μ , 1μ , 0.3μ ve 0.05μ tanecikli alumina tozları ile aşındırıldı. Daha sonra, sırasıyla trikloroetilen, aseton, metil/etil alkol içinde 15'er dakika ultrasonik temizleyicide temizlendiler ve ultra saf (de-iyonize) suda durulandılar. Bu işlem kimyasal temizlemedir. Kimyasal temizlemeden geçirilen örnekler %18 oranında %48 saflıkta HF (hidroflorik asit), %25 oranında %69 saflıkta HNO_3 (nitrik asit) ve %57 oranında %100 saflıkta CH_3COOH (asetik asit) karıştırılarak elde edilen asit çözeltisinde ortalama iki dakika askıda sallandırılıp yüzeyleri aşındırılarak homojen ayna haline getirildiler ve de-iyonize suda durulandılar.

Yüzeyleri asit ile aşındırılmış pullar kimyasal temizleme işleminden geçirildiler. Bu pullar yüzeylerinde oluşmuş ince oksit tabakasının kaldırılması için %5 HF ve %95 de-iyonize su içeren çözeltide 2 dakika boyunca askıda sallandırılıp de-iyonize suda durulandılar.

Yukarıdaki işlemlerden geçirilen silikon pullar saf argon gazı ile kurulandıktan sonra evaporatörde örnek tutucuda yerlerine konulup ortam vakumlanır (Şekil 3.5.1). 15'er dakika sırasıyla aseton ve metil alkol içinde ultrasonik temizleyicide temizlenen %99.995 saflıkta 1cm boyunda kesilmiş 0.25mm kalınlığında demir teller 2×10^{-7} mbar basınçta pulların üzerine buharlaştırılır. Pulların diğer yüzeyi çevrilerek aynı şekilde demir buharlaştırılır. Bu işlem sonucunda pulların her iki yüzeyinde ince bir demir tabakası oluşur. Pullar kirlenme olmaması için hızlıca demir difüzyonu için yüksek sıcaklık fırınına konurlar. Difüzyon işlemi, pullar 1270K'de iki saat, 1270K'de üç saat, 1270K'de 1 saat ve 970K'de 17 saat tavlandıktan sonra sıvı azota veya oda sıcaklığında suya düşürülerek yapıldı. Tavlama süreci boyunca pulların yüzeyinde oksitlenme olmaması için fırına saf argon gazı verildi.



Şekil 3.5.1: Evaporatörün blok diyagramı: 1: flaman veya botun asıldığı elektrotlar, 2: kapatici, 3: örnek tutucu, 4: cam fanus, 5: turpomoleküler pompa, 6: döner (rotary) pompa, 7: yüksek akım kaynağı.

Difüzyon işleminden sonra örneklerin yüzeyindeki fazla demir tabakasını kaldırmak için her iki yüzeyleri yukarıda anlatıldığı gibi alumina tozları ile aşındırıldıktan sonra kimyasal temizlemeye tabi tutularak asit çözeltisinde 2 dakika boyunca aşındırılarak tekrar homojen bir ayna yüzeyi elde edildi. Pullar de-iyonize suda durularak saf argon gazı ile kurulandıktan hemen sonra evaporatörde Schottky kontak almak için hazırlanan

maskeye konularak vakuma alındılar. 15'er dakika sırasıyla aseton ve metil alkolde ultrasonik temizleyicide temizlenen 2cm boyunda kesilmiş, 0.3mm kalınlığında saf alüminyum teller 2×10^{-7} mbar basınçta pulların üzerine buharlaştırılarak Schottky kontak alındı.

Ohmik kontak iki şekilde yapıldı: (i) Schottky kontağı yapılan pulların arka yüzeyleri çizilerek indiyum sürüldü ve düzgün bir şekilde küçük parçalara ayrıldılar ve bunlar bakır levhalara lehimlendi. (ii) Arkası çizilen pullar indiyum sürülmeden düzgün bir şekilde parçalanarak iki bileşenli gümüş pasta ile bakır levhaya yapıştırıldı ve sonra 10 dakika 370K'de tavlandı.

3.6 DENEY DÜZENEĞİ

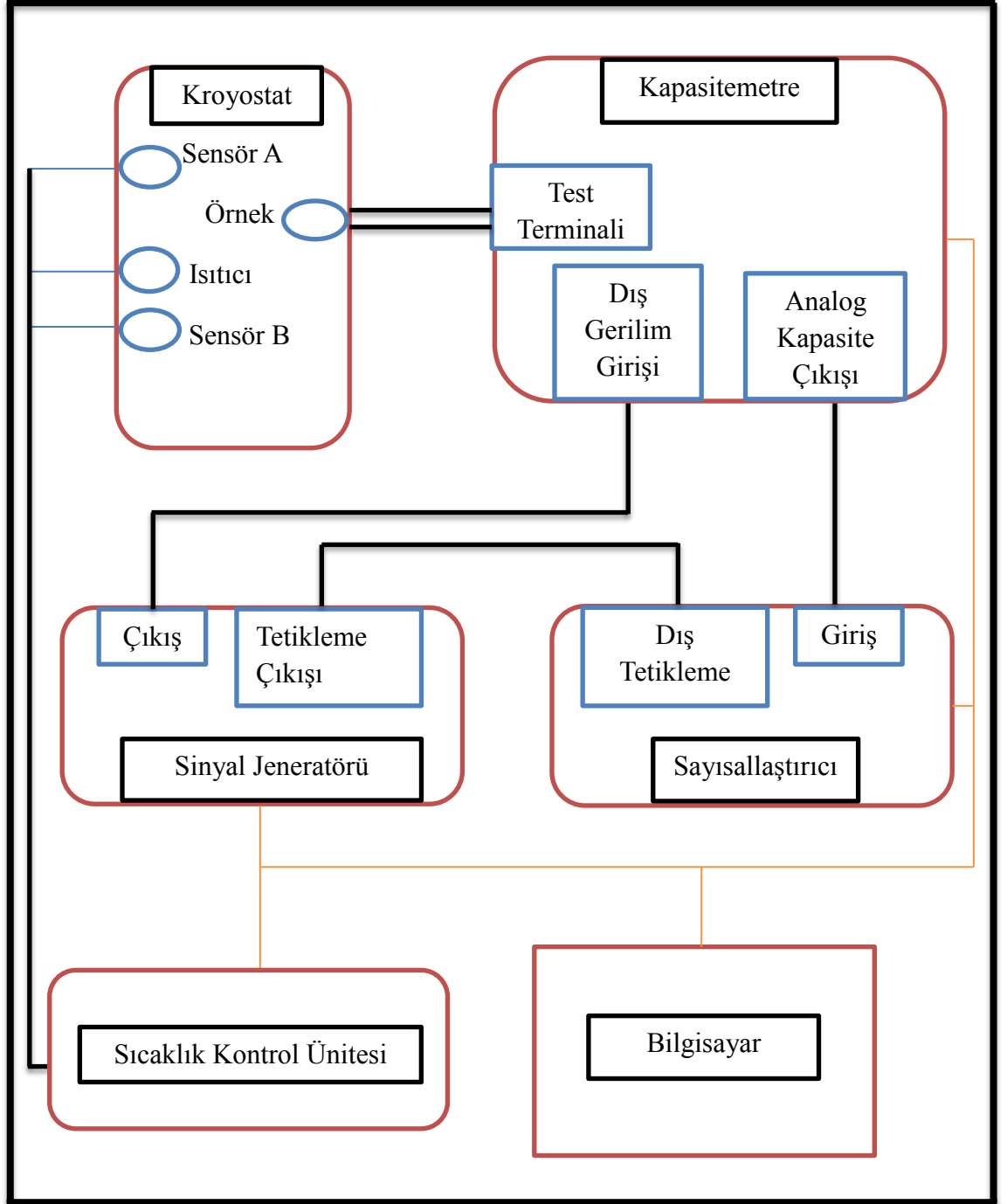
Deneylerde biri açık kroyostatlı diğeri kapalı devre kroyostatlı iki düzenek kullanıldı. Düzeneklerin elektronik kısmının tamamı bir NI-GPIB kartı aracılığıyla bilgisayarla kontrol edilir ve şu cihazlardan oluşur (Sekil 3.6.1)

1. Boonton 7200 Kapasitans Ölçer
2. Agilent 81150A Sinyal Jeneratörü
3. Agilent 3458A Multimetre (Sayısallaştırıcı)
4. LakeShore 331 Sıcaklık Kontrol Sistemi/LakeShore 325 Sıcaklık Kontrol Sistemi

Kapalı devre kroyostat helyum gazının bir kompresör ve motorlu valf aracılığıyla kapalı devrede sıkıştırılıp genişletilerek soğutulmasına dayanan bir sistemdir. Örnek tutucunun bulunduğu kısımda ısıtıcı mevcuttur, bunun hemen arkasında soğuk parmak denen kısım gelmektedir. Soğuk parmağın uç kısmında bir Si-diyot sıcaklık sensörü ve örneğin konulduğu örnek tutucuda bir Si-diyot/Pt-100 sıcaklık sensörü bulunmaktadır. Bu iki sensor yardımıyla sıcaklık LakeShore 331 sıcaklık kontrol ünitesi ile kontrol edilmektedir ve sıcaklık 8K'den 700K'e kadar taranabilmektedir. Kapalı devre kroyostat turbomoleküler pompa ile vakum altında tutulmaktadır. Kroyostat basınç 10^{-3} mbar mertebesindeyken çalıştırılmaya başlanır ve ölçümler basınç 5×10^{-4} - 10^{-5} mbar mertebelerindeyken yapılır.

Açık sistemde kroyostat bakırdan yapılmış içi boş ve bakır borular yerleştirilmiş bir silindirdir. Vakum çemberinin içine yelleştirilen kroyostatın içine bir ısıtıcı

gömülmüştür. Örnek tutucu kroyostatın üst kapağıdır ve üzerinde Pt-100 sıcaklık sensörü vardır. Burada sıcaklık LakeShore 325 sıcaklık kontrol sistemi ile kontrol edilip, kroyostat sıvı azotun kroyostatın iç kısmına gömülen bakır borulardan geçirilmesi ile soğutulmaktadır.



Şekil 3.6.1: Deney düzeneği şeması.

4. BULGULAR

4.1. VERİLERİN TOPLANMASI VE ANALİZİ

Deneyleerde ters gerilim uygulanan bir Schottky diyotunun kapasitesinin zamana bağılı geçişleri ölçüldü. Zamana bağılı kapasite geçişleri iki şekilde yapıldı. İlkinde sabit ters gerilim ve sabit uygulama zamanına sahip Şekil 3.1.1'deki gibi bir puls numuneye uygulandı ve bu puls altında numune üzerinde sıcaklık taranarak zamana bağılı kapasite geçişleri ölçüldü. Bu ölçümler farklı puls periyotlarında tekrarlandı. İkincisinde ise sıcaklık sabit tutulup uygulanan ters gerilimin genliği taranarak kapasite geçişleri ölçüldü.

Bölüm 3.2 ve Bölüm 3.3'de gösterildiği gibi Schottky diyotunun ters gerilim altındaki kapasite geçişleri incelenen sıcaklık aralığında üsteldir. Aşağıda gösterileceği gibi deney verilerinde de kapasite geçişlerinde en az üç üstel fonksiyon görülmektedir. Bu üstel davranış TID modu için, kapasitans voltaj hassasiyeti, sürüklenme ve iyonların deplasyon bölgesi dışına difüze olma süreçlerinden kaynaklanmaktadır. Bölüm 3.3'de yapılan nümerik analizler ve sonrasında anlatılan analitik yaklaşım göz önüne alınarak deney verileri hem TID ve hem TIDIF modlarında

$$a(t) = a_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + a_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right) + a_2 \exp\left(-\frac{t}{\tau_3}\right) \quad (4.1)$$

formundaki bir üstel fonksiyona fit edilerek, ön-üsteller ($a_i = \Delta C_i$, $i = 0,1,2$) ve zaman sabitleri (τ_i) bulundu. Burada a_i katsayıları her bir üstel kapasite geçişine karşılık gelen sabitlerdir ve τ_i 'ler ise her bir bileşene karşılık gelen zaman sabitleridir. Bu nicelikler sürüklenme ve geri difüzyon için bulunur ve bir dosyaya kayıt edilerek, analiz edilirler. Bir sıcaklıktaki zaman sabitinin bilinmesi ile o sıcaklıkta difüzyon katsayısı belirlenebilir ve buradan da difüzyon enerji bariyeri bulunabilir. Deneyde elde edilen sürüklenme (TID) verilerine (4.1) eşitliği fit edilerek sürüklenme için bulunan zaman sabiti verilerine, TID zaman sabiti için yazılan (3.18) eşitliği (demir boron çiftleri 370K sıcaklığa kadar ayırmadıklarından düşük sıcaklıklarda, sürüklenme verilerine (3.16) eşitliğini fit etmek yanlış olmaz) fit edilerek pozitif demirin difüzyon katsayısı ve

difüzyon enerji bariyeri bulunur. Geri difüzyon (TIDIF) verilerinden elde edilen difüzyon zaman sabiti (3.40) (veya (3.41)) eşitliğine fit edilerek yine pozitif demirin difüzyon katsayısı ve difüzyon enerji bariyeri bulunur.

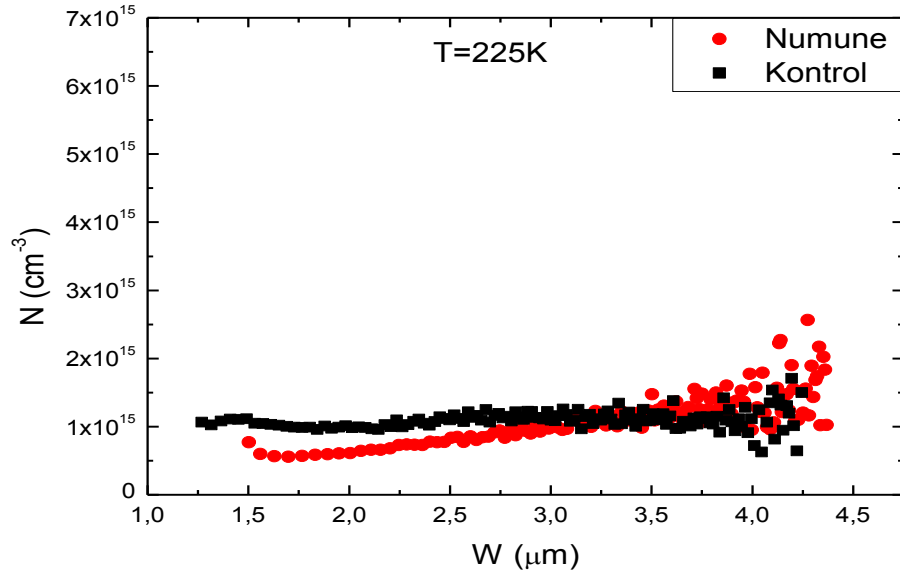
Sabit sıcaklıkta toplanan zamana bağlı kapasite-ters gerilimin genliği verilerinden elde edilen zaman sabitleri $\tau_f = W^2 / \pi^2 D_{eff} = 2\varepsilon\varepsilon_0 |V_b - V_r| / \pi^2 q N_A D_{eff}$ eşitliğine fit edilir. Burada W^2 için (3.8) eşitliği kullanıldı ve sıcaklık sabit olduğundan sıcaklığa bağlı olan efektif difüzyon katsayısı, D_{eff} sabit bir parametredir. Eşitlikteki diğer parametreler de sabit olduklarından, sabit sıcaklıkta TIDIF zaman sabiti sadece uygulanan ters gerilimle doğru orantılı olarak değişir. TIDIF zaman sabiti-ters gerilim verilerine bir doğru fit (yukarıdaki eşitlik) fit edilmesi ile pozitif yüklü demirin p-tipi silikondaki efektif difüzyon katsayısı belirlenir.

Bölüm 2.2’de anlatıldığı gibi demir oda sıcaklığında boron katkılanmış p-tipi silikon içinde pozitif olarak çözülür ve çok büyük bir bölümü boron ile çift yapar. Bununla birlikte demir oda sıcaklığında küçük bir oranda Fe_i^0 ve Fe_i^+ yük durumlarında bulunur. Numune sıtıldığında demir-boron çiftleri sıcaklığın artmasıyla ayrışmaya başlarlar ve 470K’de hemen hemen tüm demir-boron çiftleri ayrışır ve demir tamamen pozitif yük durumunda olur. Deney süreci göz önüne alındığında incelenen sıcaklık aralığında aşağıdaki reaksiyonlar meydana gelir:

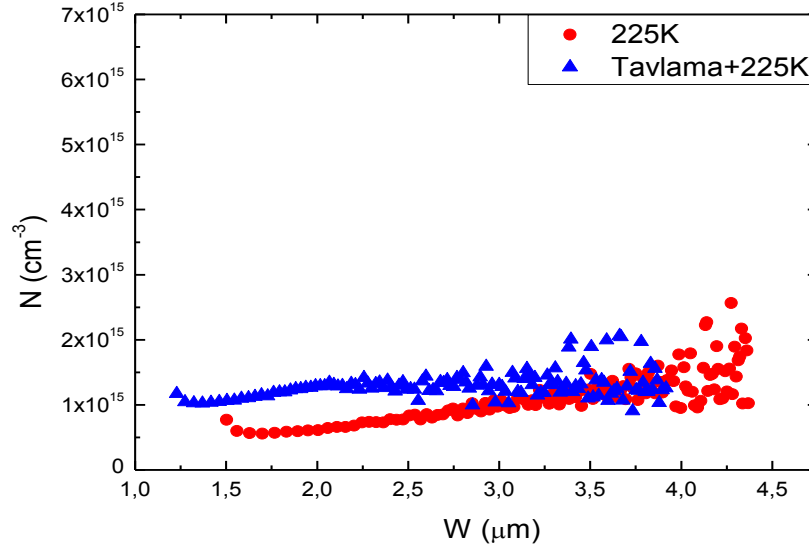


Bu reaksiyonların ilki sıcaklığın etkisi ile meydana gelir ve tüm sinyal süresince mevcuttur. İkinci reaksiyon ise uygulanan gerilime ve sıcaklığa bağlıdır: İncelenen sıcaklık aralığında $E_{Fe_i^{0/+}} + k_B T > E_F$ olduğundan; demirin tamamı pozitif yük durumundadır [13, 14], fakat diyot ters beslendiğinde bant aralığı eğrilir ve Fermi seviyesi $E_{Fe_i^{0/+}} + k_B T$ toplamının üstünde kalır ve demirin bir kısmı Fe_i^0 nötr yük durumuna geçer. Dolayısıyla ikinci reaksiyon sinyalin gerilim uygulanan kısmında etkindir.

Deneyleerde numuneye demir difüze olduğunu anlamak için DLTS ölçümleri ve kapasite-gerilim (CV) ölçümleri yapıldı. DLTS ölçümlerinde demirin $Fe_i^{0/+}$ ve $(Fe_iB_s)^{0/+}$ donör seviyeleri belirlenerek hem Fe_i^+ demirin numuneye katkılanmış olduğunu hem de bu seviyeleri oluşturan kusurlardan Fe_i^+ demirin konsantrasyonu belirlenir. CV ölçümlerinde numunenin toplam katkı seviyesi (boron+demir konsantrasyonu) belirlenir. Şekil 4.1.1 demir katkılanmış numunenin ve kontrol numunesinin 225K'de konsantrasyon-derinlik profilini göstermektedir. Demir silikon içinde pozitif olarak çözülüp ortamdaki negatif yüklü boron atomlarını (çift oluşturarak) pasifize ettiğinden toplam yüklü konsantrasyonda bir azalma meydana gelir. Katkı konsantrasyonundaki bu azalma uzay yükü bölgesinin artmasına neden olur. Bu veriler demirin silikona katkılanmış olduğunu gösteriyor. Ayrıca yapılan DLTS ölçümleri ve literatürdeki demir çözünürlük verileri [2] katkılanan demir konsantrasyonunun $2 \times 10^{14} - 4 \times 10^{14} cm^{-3}$ olduğunu gösteriyor.



Şekil 4.1.1: Demir katkılanmış numune ve kontrol numunesinin konsantrasyon-derinlik profili. Demir katkılanmış numunede Fe^+ iyonları B^- iyonları ile çift yapıp toplam yük sayısında bir azalmaya neden olarak toplam katkı konsantrasyonunda azalmaya neden olurlar.



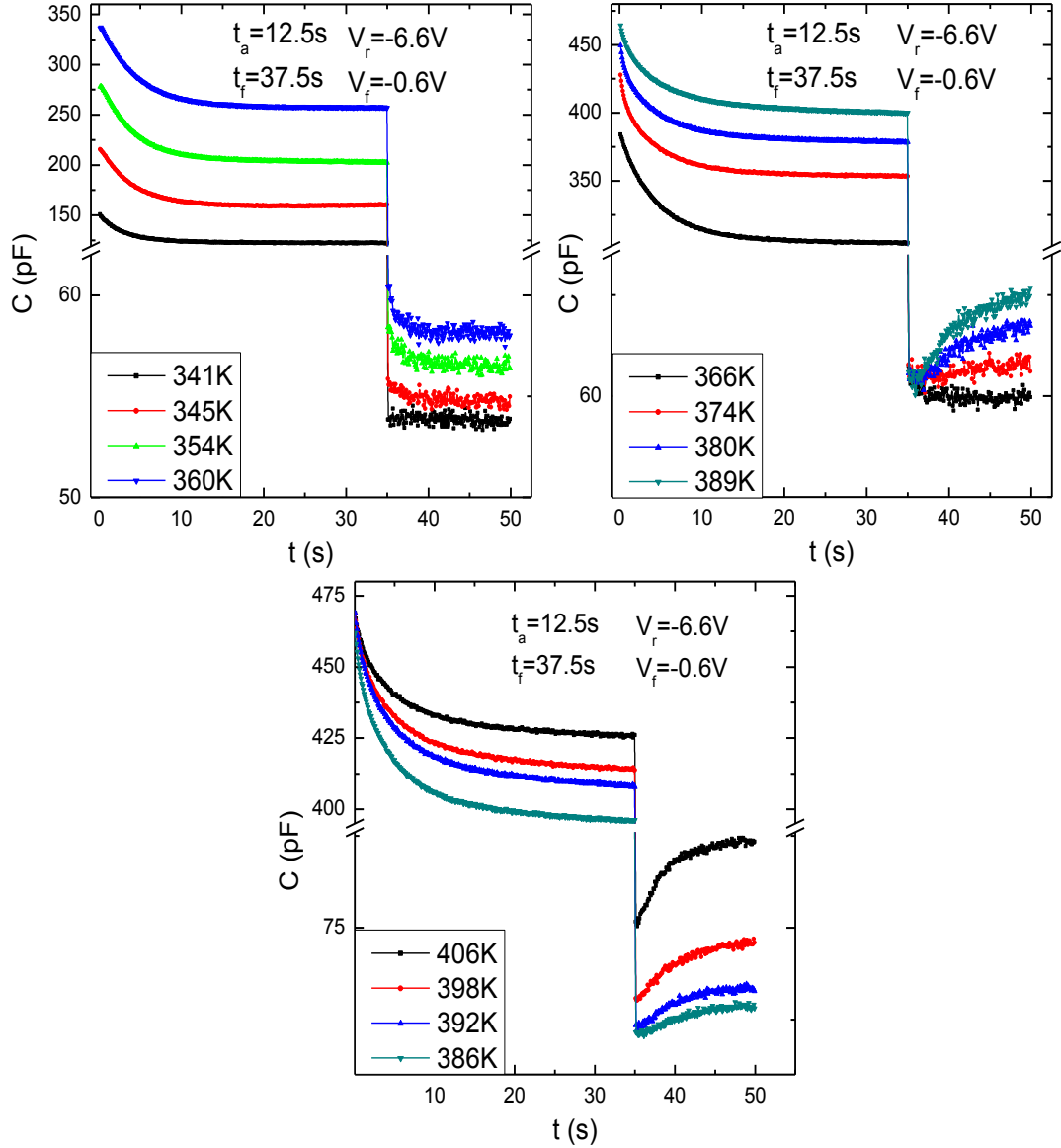
Şekil 4.1.2: Demir difüze edilmiş numunenin 225K'deki ve 433K'de tavlandıktan sonra 225K'deki konsantrasyon-derinlik profili: Tavlandıktan sonra katkı konsantrasyonunun arttığı görülüyor.

Şekil 4.1.2 Demir katkılanmış numunenin 225K'deki ve numune 433K'de 45 dakika tavlandıktan sonra tekrar 225K'deki konsantrasyon-derinlik profilini göstermektedir. Numunenin 433K'de tavllanması sonucu FeB çiftleri ayrışır ve numunenin deplasyon bölgesindeki katkı miktarı Fe_i^+ iyonlarının ortamda bulunması nedeniyle artar. Şekil 4.1.1 ile karşılaştırıldığında tavlandıktan sonraki katkı konsantrasyonunun kontrol numunesinin katkı konsantrasyonu ile hemen hemen aynı olduğu gözlenmektedir. Bu pozitif demir iyonlarının ortamdaki negatif boron atomları ile çift yapmadan serbest kaldıklarını gösterir. Gerçekte numunenin tavlandıktan sonra yapılan DLTS ölçümleri Fe_iB_s çiftine ait olan ve aktivasyon enerjisi 0.1eV olan DLTS pikinin kaybolduğunu ve demir iyonizasyonuna ($Fe_i^{+/0}$) karşılık gelen ve aktivasyon enerjisi 0.40eV olan pikin arttığı gözlenir. Bu, numune 433K'de 45 dakika tavlandıktan sonra demirin pozitif yük durumuna geçtiğini gösterir.

CV ölçümünün bir amacı da yapılan Schottky diyotlarının çalışma aralığını ve kalitelerinin belirlemektir. CV ölçümü yapılan numunelerin profillerine bakılarak hangi gerilim aralıklarında Schottky diyotun iyi çalıştığı belirlenerek (homojen konsantrasyon dağılımının olduğu bölge belirlenerek) bu gerilim aralıklarında TID ölçümleri yapılır. Deneyle farklı sıcaklıklarda elde edilen 080313diode8DSu adlı numuneye ait

TID/TIDIF ham verileri Şekil 4.1.3'de verilmektedir. Toplam puls periyodu (TID+TIDIF periyodu) 50 saniyedir. Numuneye 12.5 saniye boyunca $V_r = -6.6V$ ters gerilim uygulanmaktadır (TID periyodu) ve 37.5 saniyelik TIDIF periyodu boyunca $V_f = -0.6V$ düzlenme gerilimi uygulanmaktadır. Düşük sıcaklıklarda kapasite geçişleri demir iyonların hareketinin çok yavaş olması ve ortamdaki negatif boron atomları ile çift yapmaları nedeniyle hemen hemen yoktur. 340K'den sonra sinyalin TID kısmında demir iyonlarının sürüklenmesi sonucu kapasite geçişleri görülmeye başlanmaktadır. TID sinyal geçişleri Bölüm 3.3'de yapılan ve şekil 3.3.5 (a)'da gösterilen simülasyonlarla aynı davranışları göstermektedir. 341K'den 365K'e kadar kapasite geçişleri azalmaktadır. Bu davranış sürüklenen demir iyonlarının deplasyon bölgesinin sonuna doğru sürüklenirken ortamdaki negatif yüklü boron atomları ile çift oluşturmalarından dolayı deplasyon bölgesinin sonuna ulaşamamaları ve kapasite hassasiyetinin etkisinin bu sıcaklıklarda çok güçlü olmasından kaynaklanmaktadır. 365K üstündeki sıcaklıklarda TID sinyalleri artan yöndedir ve sıcaklık arttıkça kapasite hassasiyeti etkisi giderek yok olmaktadır. 385K'den sonra kapasite geçişlerinde aşağı doğru olan azalma (kapasite hassasiyeti) gözlemlenmeyecek kadar küçük olmaktadır ve TID kapasite geçişleri sıcaklıkla hızlanmaktadır.

Şekil 4.1.2 Demir katkılanmış numunenin 225K'deki ve numune 433K'de 45 dakika tavlandıktan sonra tekrar 225K'deki konsantrasyon-derinlik profilini göstermektedir. Numunenin 433K'de tavllanması sonucu FeB çiftleri ayrışır ve numunenin deplasyon bölgesindeki katkı miktarı Fe_i^+ iyonlarının ortamda bulunması nedeniyle artar. Şekil 4.1.1 ile karşılaştırıldığında tavlandıktan sonraki katkı konsantrasyonunun kontrol numunesinin katkı konsantrasyonu ile hemen hemen aynı olduğu gözlenmektedir. Bu pozitif demir iyonlarının ortamdaki negatif boron atomları ile çift yapmadan serbest kaldıklarını gösterir. Gerçekte numunenin tavlandıktan sonra yapılan DLTS ölçümleri Fe_iB_s çiftine ait olan ve aktivasyon enerjisi 0.1eV olan DLTS pikinin kaybolduğunu ve demir iyonizasyonuna ($Fe_i^{+/0}$) karşılık gelen ve aktivasyon enerjisi 0.40eV olan pikin arttığı gözlenir. Bu numune 433K'de 45 dakika tavlandıktan sonra demirin pozitif yük durumuna geçtiğini gösterir.



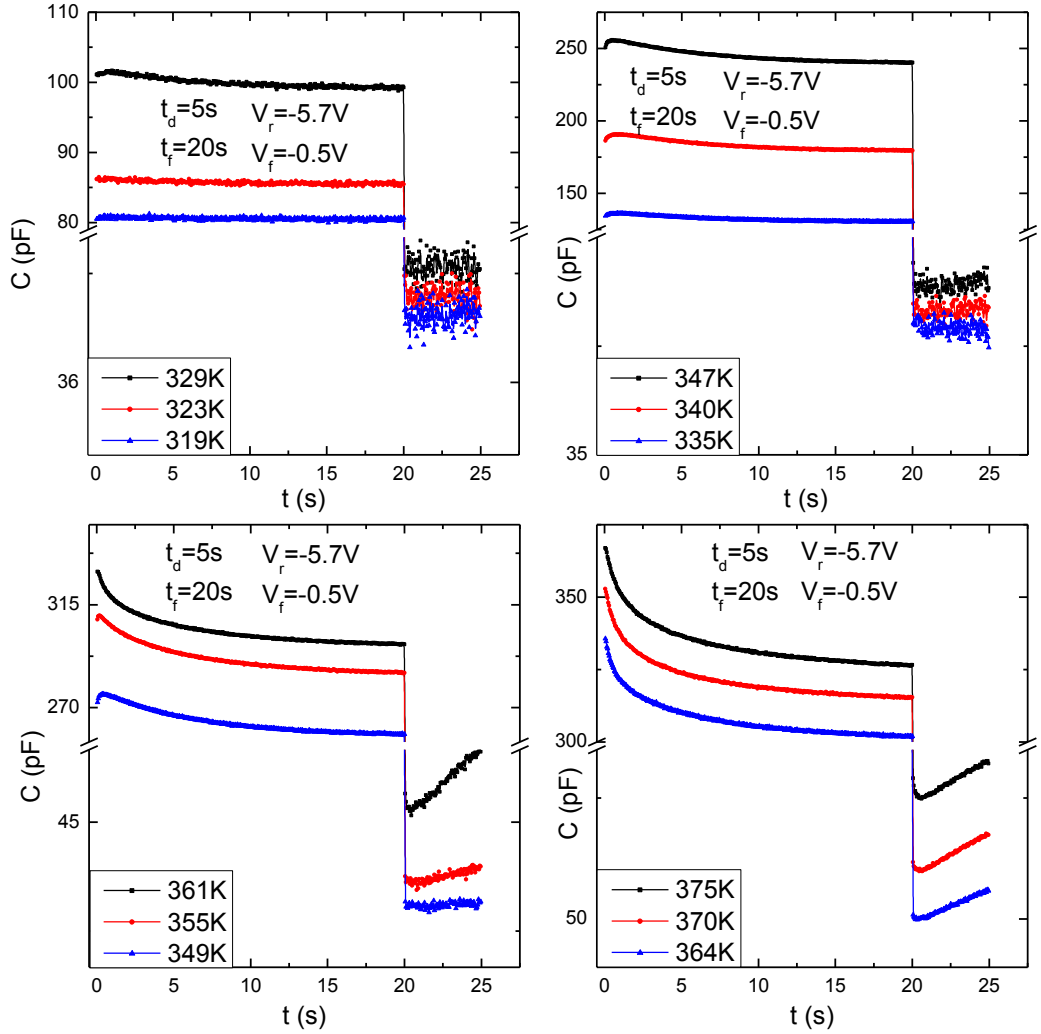
Şekil 4.1.3: Farklı sıcaklıklarda ham TID ve TIDIF verileri: Bu veriler 080313diode8Su adlı diyota aittir. Burada veriler toplanırken önce TIDIF periyodu sonra TID periyodu kaydedilmiştir. Kapasite geçişleri Bölüm 3.4’de yapılan ve Şekil 3.3.5’de verilen simülasyonlardaki kapasite geçişleri ile aynı karaktere sahiptirler. TID geçişleri düşük sıcaklıklarda demir iyonları deplasyon bölgesinin sonuna kadar sürüklenmeden boron iyonlarına yakalandıkları için ve güçlü kapasite hassasiyetinden azalmaktadırlar. Sıcaklık artıkça geçişler hızlanmakta ve başlangıçta var olan kapasite azalması yok olmaktadır. TIDIF geçişleri de Şekil 3.3.5(b)’deki kapasite geçişleri ile aynı davranışı göstermektedir. Veri toplama koşulları şeklin üzerinde belirtilmiştir.

TIDIF sinyalleri Şekil 3.3.5(b)’deki simülasyonlarla aynı şekilde davranmaktadırlar. Burada Şekil 3.3.5(b)’den farklı olarak TID kapasite geçişlerinin azaldığı 341K’den 365K’ye kadar olan sıcaklıklarda TIDIF sinyallerinin sürüklenen iyonların geriye difüze

olduğunu gösterecek şekilde azalmalarıdır. Oysa Şekil 3.3.5(b)'de TID kapasite geçişlerinin azaldığı sıcaklıklarda TIDIF kapasite geçişleri artmaktadır ve bu artış iyonların geri difüze olacak zamanı bulamadıklarını göstermektedir. Bu farklılık numunenin tavlanması sonucu demir iyonlarının serbest hale geçmelerinden kaynaklanmaktadır. Ayrıca ters gerilim uygulandığında diyotun bant aralığının bükülmesi sonucu serbest demir seviyesinin Fermi seviyesi altında kalmasından dolayı demir iyonlarının nötr hale geçmeleri ve ters gerilimin kaldırılmasıyla elektron yayımlayarak pozitif yük durumuna geçmeleri sinyalin TIDIF kısmında görülen kapasite geçişine katkı sağlamaktadır. 385K'den sonra TIDIF kapasite geçişlerinin genlikleri küçülmektedir fakat giderek hızlanmaktadır. Genliklerdeki azalmanın nedeni deplasyon bölgesinin sonuna sürüklenen iyonların termal difüzyon ile deplasyon bölgesinin dışına doğru sürüklenmeleridir. Gerçekten 080313diode8Su adlı numunede 406K'den sonraki sıcaklıklarda 50 saniyelik toplam puls periyodu için deplasyon bölgesinin sonuna sürüklenen iyonların büyük bir kısmı dışarı difüze olmaktadır ve TID sinyalleri azalmaktadır; dolayısıyla bu çalışmadaki model 406K'den sonraki sıcaklıklarda bu diyota uygulandığında doğru bilgiler elde edilemez.

Şekil 4.1.4 080313diode12 adlı numuneye ait -5.7V ters gerilim altında sürüklenme (TID) ve -0.5V düzlenme gerilimi altında geri difüzyon (TIDIF) verileridir. Sürüklenme periyodu 5 saniye ve geri difüzyon periyodu 20 saniyedir. Bu numune tavlanmadan veri toplanmaya başlandı. TID kısmında 340K'e kadar bir kapasite geçişi gözlenmemektedir; 346K'de küçük bir azalma ve ardından küçük bir artma görülmektedir. 346K'den sonra kapasite geçişlerinin genlikleri büyürken geçişin başlangıcındaki azalma da sıcaklığa bağlı olarak küçülmektedir. Burada 5 saniyelik sürüklenme periyodu TID sinyalinin dengeye ulaşmasına yetmemektedir. TID verileri simülasyon verileri (Şekil 3.3.5(a)) ile uyumludur.

TIDIF kısmında Şekil 4.1.3'den farklı olarak sinyalin başlangıcında bir artma görülmektedir. Bu kısa süreli küçük artma sıcaklıkla azalmaktadır ve 360K'de bitmektedir. Ayrıca TIDIF kapasite geçişleri 340K'e kadar başlangıçtaki küçük artış haricinde meydana gelmemektedirler. Bu iki farklılık numunenin tavlanmasından kaynaklanmaktadır.

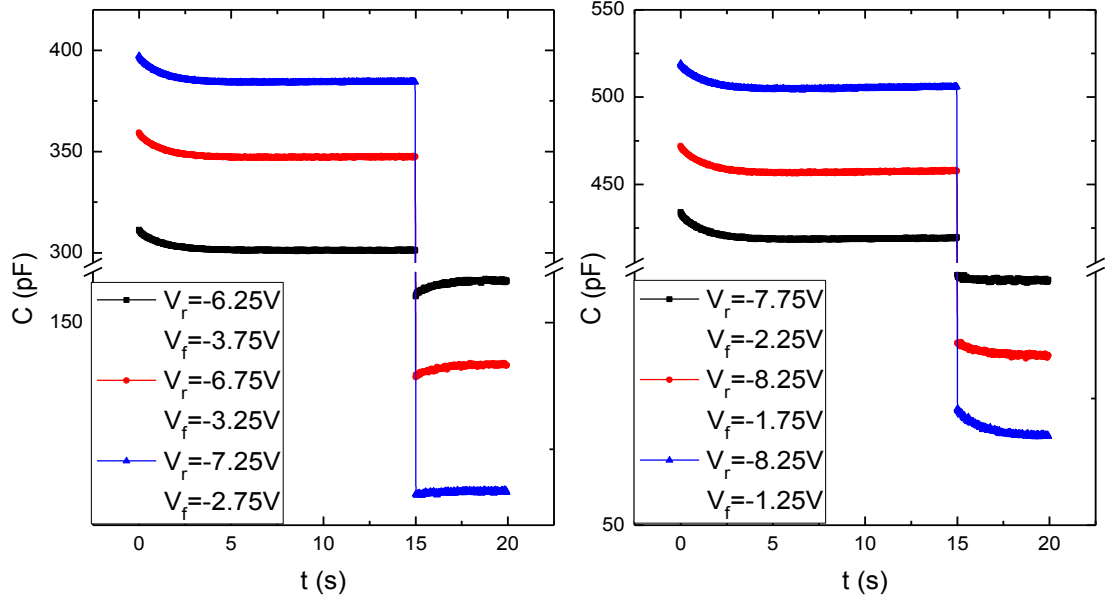


Şekil 4.1.4: 080313diode12 adlı numuneye ait TID ve TIDIF verileri: Bu numune tavlansız olarak veriler toplanmıştır. Burada Şekil 4.1.3'den farklı olarak TID geçişleri daha yüksek sıcaklıklarda gözlemlenmektedir ve TIDIF geçişinin başlangıcında bir kapasite artışı mevcuttur. Veri toplama koşulları şeklin üzerinde belirtilmiştir.

Numune 433K gibi sıcaklıklarda tavlendiğinde demir iyonları serbest hale gelirler ve ters gerilim altında sürüklenmeden sonraki periyotta, yani ters gerilim kaldırıldığında, tekrar geri difüze olabilecek iyon miktarı kapasite geçişine yol açabilecek kadar fazladır. Eğer numune tavlansızsa demir iyonları yaklaşık 370K sıcaklığa kadar çiftlerden ayrılmazlar ve bu sıcaklıklara kadar kayda değer bir kapasite geçişi gözlemlenmek mümkün değildir. Başlangıçtaki küçük artış iyonların sürüklenme periyodunun 370K'den düşük sıcaklıklar için kısa olmasından yani iyonların sürüklenmesinin uygulanan gerilim altında dengeye ulaşmamasından kaynaklanır:

Tavlanan numunede iyonlar serbesttir ve daha hızlı sürüklenirler dolayısıyla TID geçişleri dengeye ulaşmak için daha az zaman gerektirir. Şekil 4.1.3’de TIDIF geçişlerinde başlangıçtaki küçük artışların olmaması numunenin tavlanması ve TID periyodunun uzun olmasıdır. Şekil 4.1.4’de ise numune tavlanmadığı için demir iyonlarının büyük bir kısmı boron iyonları ile çift yapmış durumdadır. Şekil 4.1.4’de 350K’e kadar TIDIF sinyalinde başlangıçta görülen artış, serbest olan demir iyonlarının ters gerilim altında sürüklenirken sürüklenme periyodunun kısa olması nedeniyle ters gerilim kaldırıldığı halde oluşan konsatrasyon gradyenti ile aynı yönde bir süre daha sürüklenmeye devam etmesinden kaynaklanmaktadır. Yaklaşık 360K’de TIDIF sinyalinde başlangıçtaki artış tamamen yok olmaktadır. 370K’den sonraki sıcaklıklarda demir iyonları boron ile yaptıkları çiftlerden ayrışır ve kapasite geçişleri hızlanır. Bu sıcaklıklarda TID sinyallerinde başlangıçtaki azalma ve TIDIF sinyallerinde başlangıçtaki artış gözlenmemektedir. Özellikle 400K gibi sıcaklıklarda TID sinyallerinde geri difüzyonun etkisi ve TIDIF sinyallerinde sürüklenmenin etkisi demir iyonları serbest ve yeterince hızlı oldukları için tamamen yok olur.

Şekil 4.1.5’te sabit sıcaklıkta farklı V_r ters gerilimleri ve farklı V_f düzlenme gerilimleri için zamana bağlı olarak toplanan zamana bağlı kapasite verileri gösterilmektedir. Bu veriler 29_10_12diode5 adlı isimli numune üzerinden toplandı. Burada sinyalin TIDIF kısmında V_r geriliminin mutlak değeri arttıkça sinyalin üstel kısmının yavaşladığı görülebilir. Sinyalin genliğinin uygulanan gerilimin genliği arttıkça arttığı görülüyor. Ters gerilimin mutlak değeri arttıkça diyotun deplasyon bölgesi daha çok genişler. Bu ise sürüklenen iyonların tamamen geri difüze olması için gereken zamanın uzamasına neden olur. (3.8) ve (3.38) bağıntılarından τ_f düzlenme zamanının (geri difüzyon zamanı/ TIDIF zaman sabiti) uygulanan ters gerilimle doğru orantılı olduğu görülüyor. Ters gerilimin mutlak değerinin artmasıyla iyonlar deplasyon bölgesinin dışına çıkmaya başlarlar ve bu süreç gerilimin artışına bağlı olarak hızlanır. Bu numune daha önce 470K’de 30 dakika tavlandığı için Şekil 3.3.8 (a)’da gösterilen simülasyon verilerinde TID sinyalinin başında görülen küçük kapasite azalması görülmemektedir.



Şekil 4.1.5: Kapasite geçişi-ters gerilim verileri: Sabit sıcaklıkta farklı ters gerilimler ve farklı düzlenme gerilimleri için zamana bağlı kapasite geçişleri yavaşlar ve ters gerilimin uygulandığı kısımda belli bir gerilim değerinden sonra demir iyonları deplasyon bölgesi dışına çıkarak ters gerilim altında kapasitenin azalmasına neden olurlar.

Sıcaklık taranarak ve sabit sıcaklıkta uygulanan ters gerilim taranarak toplanan veriler Bölüm 3.3’de anlatılan modelin nümerik çözümlerinin simülasyonlarına dayanarak yazılan (4.1) ifadesine fit edilerek hem TID zaman sabiti τ_d hem de TIDIF zaman sabiti τ_f bulunabilir. Burada üstellerin ön sabitleri o üstele ait ΔC_i , ($i = 1, 2, 3, \dots$) kapasite değişimini ve üstellerin relaksasyon sabitleri de o üstele ait τ_i , ($i = 1, 2, 3, \dots$) zaman sabitlerini verir. Bu şekilde elde edilen zaman TID sabiti-sıcaklık ($\tau_i - T$) verileri (3.18) eşitliğine fit edilerek difüzyon katsayısının D_0 , ön-üsteli ve ΔE (E_m) difüzyon enerji bariyeri bulunabilir. Yukarıda anlatıldığı gibi elde edilen TIDIF zaman sabiti-sıcaklık verileri (3.40) eşitliğine fit edilerek yine difüzyon katsayısının D_0 , ön-üsteli ve ΔE difüzyon enerji bariyeri elde edilir. Sabit sıcaklıkta numuneye uygulanan ters gerilime bağlı olarak elde edilen TIDIF zaman sabiti- ters gerilimin mutlak değeri verileri ise (3.8) ve (3.38) bağıntılarından elde edilen

$$\tau_f = \frac{2\varepsilon\varepsilon_0}{\pi^2 q N_A D_{eff}} |V_b - V_r| \quad (4.3)$$

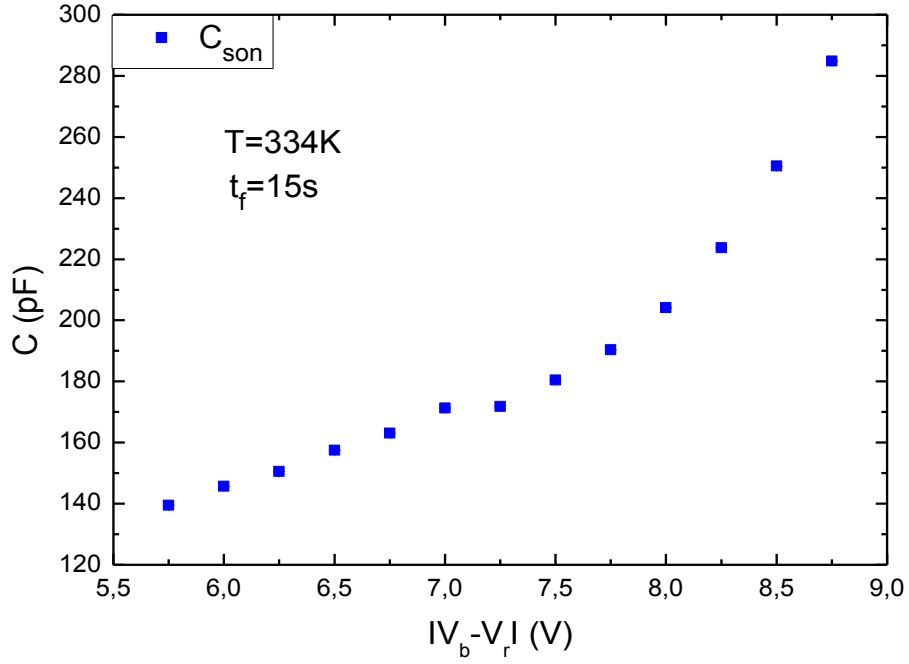
eşitliğine fit edilerek sabit bir sıcaklıkta efektif difüzyon katsayısı bulunabilir. (4.3) ifadesinde mutlak değer önündeki terim sabit sıcaklıkta bir sabittir, dolayısıyla bu ifade

bir doğru denklemi olarak alınıp verilere lineer fit yapılarak D_{eff} efektif difüzyon katsayısı belirlenebilir. D_{eff} için Denklem (2.1) kullanılarak difüzyon katsayısının ön-üsteli ve difüzyon enerji bariyeri elde edilebilir.

Burada önce sabit sıcaklıkta farklı ters gerilimler altında zamana bağlı TIDIF verileri değerlendirilecektir. Uygulanan farklı ters gerilimler altında zamana bağlı kapasite verileri toplanmadan önce, numune üzerinden sıcaklık taranarak zamana bağlı kapasite ölçümleri yapılır. Bu veriler değerlendirilerek maksimum kapasite geçişlerinin meydana geldiği sıcaklık noktaları belirlenerek ve bu noktalarda ters gerilim taranarak zamana bağlı kapasite verileri toplanır. 400K ve üzeri sıcaklıklarda diyotu uzun süre tavlama diyotun bozulmasına neden olduğundan ters gerilim-zamana bağlı kapasite verileri daha düşük sıcaklıklarda toplandı ve veriler toplanmadan önce demir iyonlarının serbest duruma geçmeleri için diyotlar belirli sürelerde (30-45 dakika) (433K, 443K, 470K) tavlandı.

29_10_12diode5 adlı Schottky diyotuna 334K'de toplam puls zamanı 20 saniye olan bir gerilim pulsu uygulandı. Bu puls süresinin 5 saniyesi boyunca diyoda ters gerilim uygulandı ve 15 saniye boyunca düzlenme gerilimi altında iyonların geri difüze olmaları için beklendi. Bu deney sonucunda toplanan verilerin TIDIF kısmının üç bileşenli bir fonksiyona (4.1 ifadesine) fit edilmesi ile Şekil 4.1.6, Şekil 4.1.7 ve Şekil 4.1.8'deki veriler elde edildi.

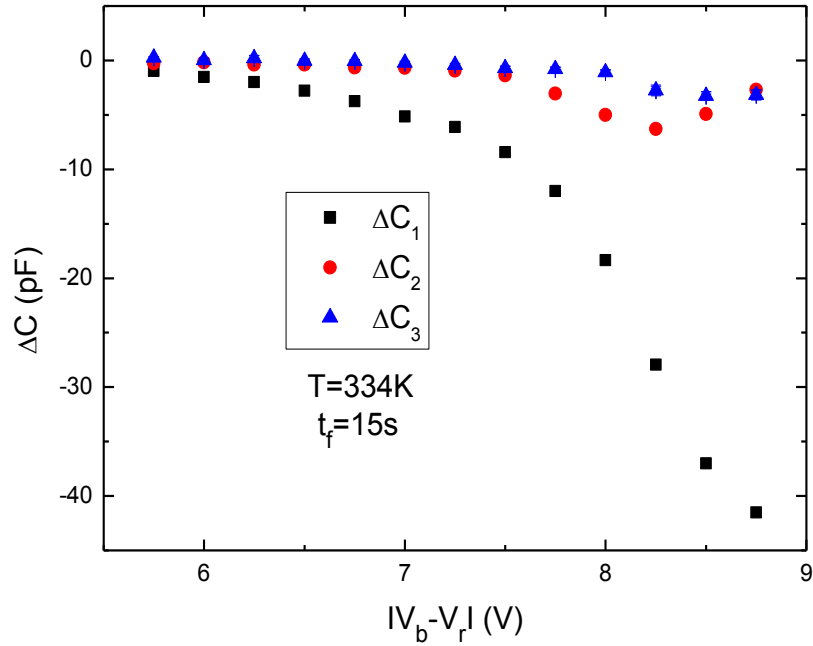
Şekil 4.1.6, maksimum kapasite C_{son} , ters gerilimin mutlak değeri verilerini göstermektedir. Buradaki veriler CV verileri gibi görünmektedir fakat tam olarak aynı değildir, çünkü kapasite verileri düzlenme geriliminin olduğu kısma (TIDIF) aittir ve düzlenme gerilimi her veri noktasında yüzeye yaklaşır dolayısıyla uygulanan gerilimin genliği arttıkça maksimum kapasitenin büyüklüğü artar. Bu davranış diyotun doğru bir şekilde çalıştığını göstermektedir.



Şekil 4.1.6: Sabit sıcaklıkta maksimum kapasite değerinin uygulanan ters gerilimin mutlak değerine göre değişimi.

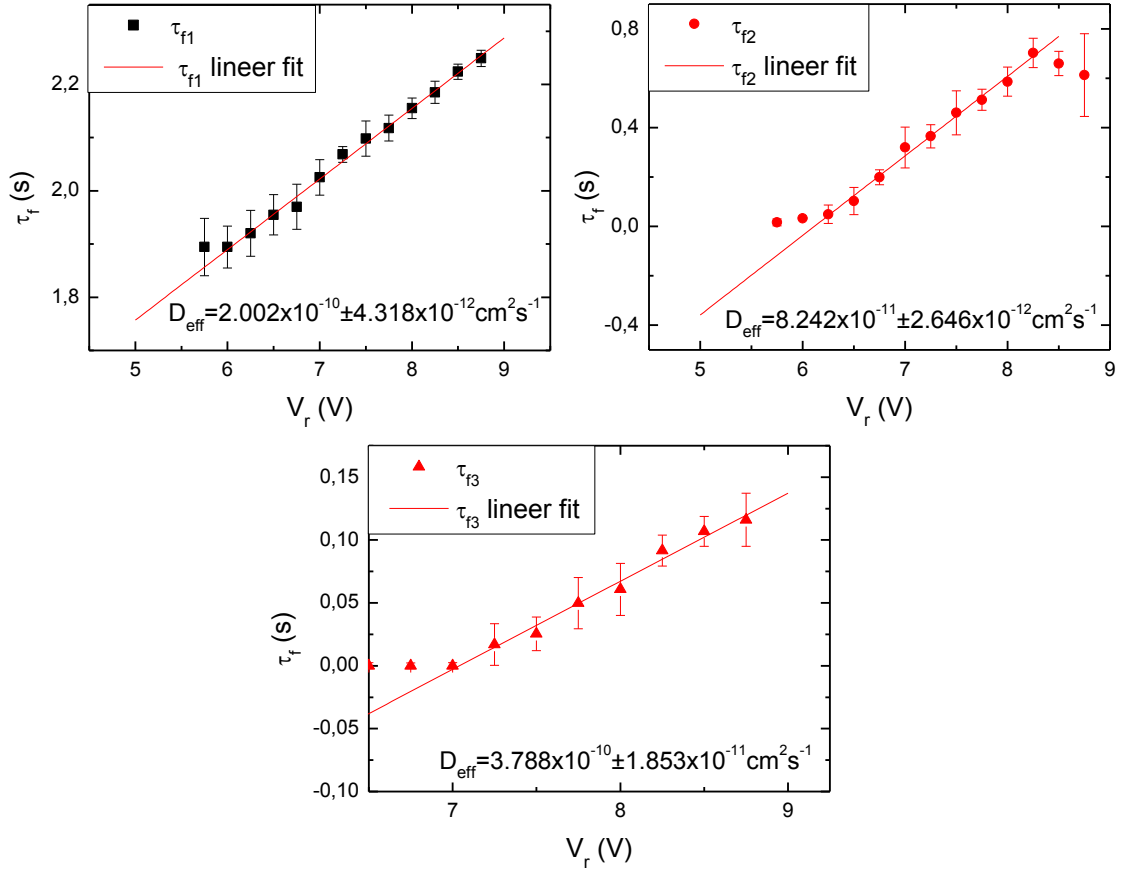
Şekil 4.1.7, 334K sabit sıcaklıkta, 29_10_12diode5 adlı numuneye ait 334K’de farklı ters gerilimdeki zamana bağlı kapasite-ters gerilim verilerine (4.1) ifadesinin fit edilmesinin ile elde edilen ΔC kapasite değişimlerinin uygulanan ters gerilimle değişimini gösteriyor. Burada birinci bileşen, ΔC_1 tüm sinyal boyunca vardır ve ters gerilimin artmasıyla üstel olarak negatif yönde artar; yani mutlak olarak artar. ΔC_2 bileşeni 6V’dan sonra başlıyor ve 8.25V’a kadar birinci bileşenle aynı davranışı gösteriyor fakat değişimin genliği daha küçüktür. 8.25V’dan sonra aksi yönde bir değişim gösteriyor. Üçüncü bileşen ΔC_3 ise 7V’dan sonra başlıyor ve üstel bir değişim gösteriyor. Her üç bileşenin farklı olması bunların farklı süreçlere karşılık geldiğini gösterir. Birinci bileşen tamamen serbest demir iyonlarının geri difüzyonuna karşılık gelir: Tüm ters gerilimlerde mevcuttur ve Şekil 4.1.8’de gösterildiği gibi karşılık gelen zaman sabiti uygulanan ters gerilimin mutlak değeri ile doğru orantılıdır. Bu bileşenin zaman sabitinin diğer bileşenlere daha büyük olması bu süreçte pozitif demirin ortamdaki negatif boron atomları ile çift oluşturarak difüze olduğuna işaret eder. İkinci bileşen demir-boron çiftlerinin ayrışmasıyla serbest kalan demir iyonlarının difüzyonuna karşılık gelebilir. İkinci bileşenin zaman sabiti üçüncü bileşene göre daha

büyüktür fakat birinci bileşenin zaman sabitinden de küçüktür. Birinci bileşen demir iyonlarının çift oluşturarak difüze olduklarını gösterir, dolayısıyla TIDIF zaman sabiti difüzyon zaman sabiti ve demir-boron çift oluşum zaman sabitinin toplamından oluşur. İkinci bileşenin zaman sabiti ise difüzyon ve çift ayrışım zaman sabitlerinin toplamından oluşur. Üçüncü bileşen serbest demir iyonlarının geri difüzyonuna aittir fakat buradaki süreç diğer iki bileşene göre daha hızlıdır ve ters gerilim mutlak değerce küçüldüğünde gözlenmemektedir. Üçüncü bileşen, numuneye mutlak değerce büyük ters gerilimler uygulandığında deplasyon bölgesinin sonunda büyük bir konsantrasyon gradyenti oluştuğunu ve ters gerilim kaldırıldığında büyük konsantrasyon gradyenti nedeniyle geriye difüzyonun çok daha hızlı olduğunu gösterir. Üçüncü bileşenin zaman sabiti ise sadece difüzyon zaman sabitidir.



Şekil 4.1.7: ΔC kapasite değişimi-ters gerilimin mutlak değeri değişimi:

$T=334K$ 'de puls yüzdesi 25 olan 0.05Hz frekansına sahip bir gerilim pulsuyla alınan verilerin (4.1) fonksiyonuna fit edilmesiyle elde edilen ΔC kapasite değişimlerinin ters gerilimin mutlak değerine göre değişimleri her bileşen için farklıdır. ΔC_1 bileşeni üstel bir azalış gösterirken, ΔC_2 bileşeni üstel bir şekilde azalıp tekrar üstel bir artış gösteriyor. ΔC_3 bileşeni birinci bileşenden daha küçük bir değişim göstermektedir.



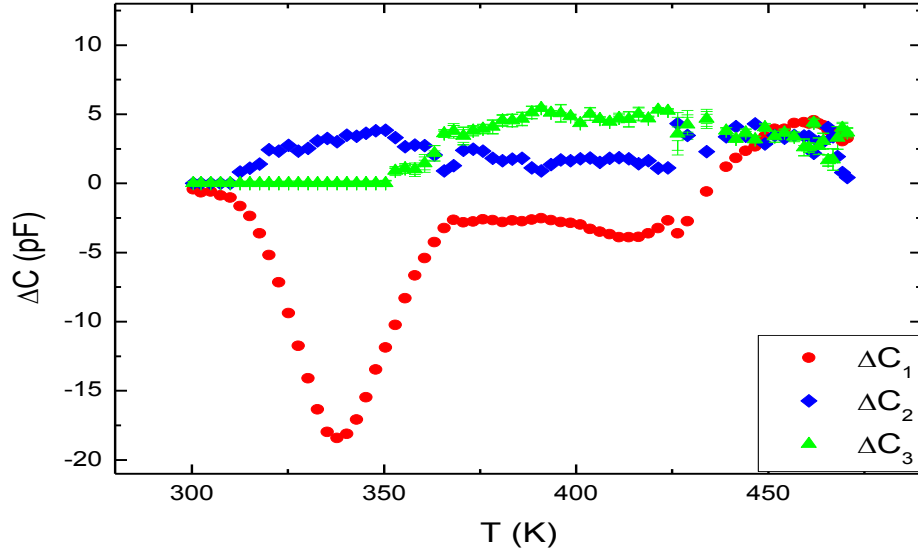
Şekil 4.1.8: Zaman sabiti-ters gerilimin mutlak değeri verileri: τ_{f1} ilk bileşeni, ters gerilimin mutlak değeri ile doğru orantılıdır. İkinci bileşen τ_{f2} , 6V'dan sonra başlıyor ve 8.25V'a kadar doğru ters gerilimle doğru orantılıdır. Üçüncü bileşen, τ_{f3} , 7V'dan sonra başlıyor ve ters gerilimle doğru orantılıdır. Deney koşulları şeklin üzerinde belirtilmiştir.

Üstel bir davranış gösteren bu kapasite değişimlerinin zaman sabitleri Denklem (4.3)'de verildiği gibi ters gerilimin mutlak değeri ile doğru orantılıdır. Şekil 4.1.8 yukarıda anlatılan (Şekil 4.1.7) üç bileşenli üstel fonksiyonun fit edildiği verilerin zaman sabitlerinin uygulanan ters gerilimin mutlak değerine göre değişimini gösterir. Burada beklendiği gibi zaman sabitleri ters gerilimin mutlak değeri ile doğru orantılıdır. Birinci bileşen, τ_{f1} tüm sinyal boyunca mevcuttur ve ters gerilimin mutlak değeri ile lineer olarak artar. Bu bileşene yapılan lineer fit ile 334K'de efektif difüzyon katsayısı $D_{eff} = 2.002 \times 10^{-10} \pm 4.318 \times 10^{-12} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ bulunur. İkinci bileşen, 6V'dan itibaren başlıyor ve 8.25V'a kadar lineer bir davranış gösteriyor. Bundan sonraki gerilim değerleri için Şekil 4.1.7'de görüldüğü gibi davranışı değişiyor ve dolayısıyla lineerlikten sapıyor. İkinci bileşenin 6V-8.25V arasında lineer fit edilmesi ile 334K'de

bulunan efektif difüzyon katsayısı $D_{eff} = 8.242 \times 10^{-11} \pm 2.646 \times 10^{-12} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ 'dir. Üçüncü bileşen, τ_{f3} , 7V'ta başlıyor ve lineer olarak ters gerilimin mutlak değeri ile artıyor. Buna yapılan lineer fit ile $D_{eff} = 3.788 \times 10^{-10} \pm 1.853 \times 10^{-11} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ bulunur. Ortalama olarak difüzyon katsayısı için $D_{eff} = 2.205 \times 10^{-10} \pm 1.495 \times 10^{-11} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ bulunur. Şekil 3.3.9'da simülasyon verileri için 390K sıcaklıkta bulunan D_{eff} değeri ise $D_{eff} = 9.68 \times 10^{-10} \pm 1.9 \times 10^{-11} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ 'dir. Bu değer, yukarıda verilen deneysel sonuçtan yaklaşık olarak bir merteye daha yüksektir. Simülasyonlarda difüzyon katsayısı ön-üsteli için bulunan ortalama $2.7 \times 10^{-2} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ değeri kullanıldığında yukarıdaki deneysel ortalama efektif difüzyon katsayısına ve simülasyon verilerinden elde edilen efektif difüzyon katsayısına karşılık gelen difüzyon enerji bariyeri her iki değer için de yaklaşık olarak $E_m = 0.55 \text{eV}$ olarak hesaplanır. Şekil 4.1.8'deki verilerden elde edilen fiziksel nicelikler Bölüm 3.3'deki nümerik çözümlerden elde edilen simülasyonlarla uyum içindedir.

Bu kısımda önce TIDIF verileri incelenecek ve daha sonra TID verileri ile karşılaştırılacaktır. Deneysel elde edilen zamana bağlı kapasite geçişleri-sıcaklık verilerinin yukarıda anlatıldığı gibi uygun üstel fonksiyonlara fit edilmesi ile $\Delta C = C_0 - C_\infty$ kapasite genliği değişimi sıcaklık verileri ve bunlara karşılık gelen zaman sabitleri elde edilir. Şekil 4.1.9, 300K-470K sıcaklık aralığında 080313diode11Su adlı numune üzerinden alınmış zamana bağlı kapasite geçişlerinin üç üstelden oluşan bir fonksiyona fit edilmesi ile elde edilen ΔC , kapasite genliği değişimi-sıcaklık verilerini göstermektedir. Deneysel verilerinin üç bileşenli bir üstel fonksiyona fit edilmesi ile elde edilen bu veriler üç farklı kapasite genliği değişimi vermektedir. Her bileşen farklı sıcaklıkta ortaya çıkmaktadır ve belirli sıcaklık aralığında üçü birlikte bulunmaktadır. Bu, sıcaklığın fonksiyonu olarak nümerik çözümlerde olduğu gibi farklı süreçlerin ortaya çıktığını gösteriyor. Ayrıca yapılan deneyler nümerik çözümlerde olduğu gibi, pulsun uygulama süresinin bu bileşenleri gözlemlemekte etkili olduğunu göstermektedir. Kısa süreli pulslarda değişimin tamamı gözlemlenememektedir. Şekil 4.1.9'da 340K civarında ΔC_1 bileşeninde büyük bir dip vardır. Bu dip demir difüzyonuna ait değildir. Tüm numunelerde görülen bu değişimin zaman sabiti sıcaklıkla artmaktadır. Numuneler 420K-470K sıcaklıklarda belirli sürelerde (30-45 dakika) tavlama süreci 300K-365K arasında demir difüzyonundan kaynaklanan ne TID ne de TIDIF sinyalleri gözlemlendi. Deneyde TIDIF sinyalinde(Şekil 4.1.9'da

340K civarında) ΔC_1 kapasite değişiminde dip oluşurken, aynı sinyalin TID kısmında herhangi bir kapasite geçişi gözlenmemektedir. TID sinyalleri aşağıda gösterileceği gibi 350K'den sonra gözlenmektedirler. Yukarıda bahsi geçen dip demirin ortamdaki katkılarla yaptığı farklı etkileşimlerden kaynaklanabilir. Bu çalışmada kullanılan modellerle bu dipin zaman sabitini analiz etmek mümkün değildir.

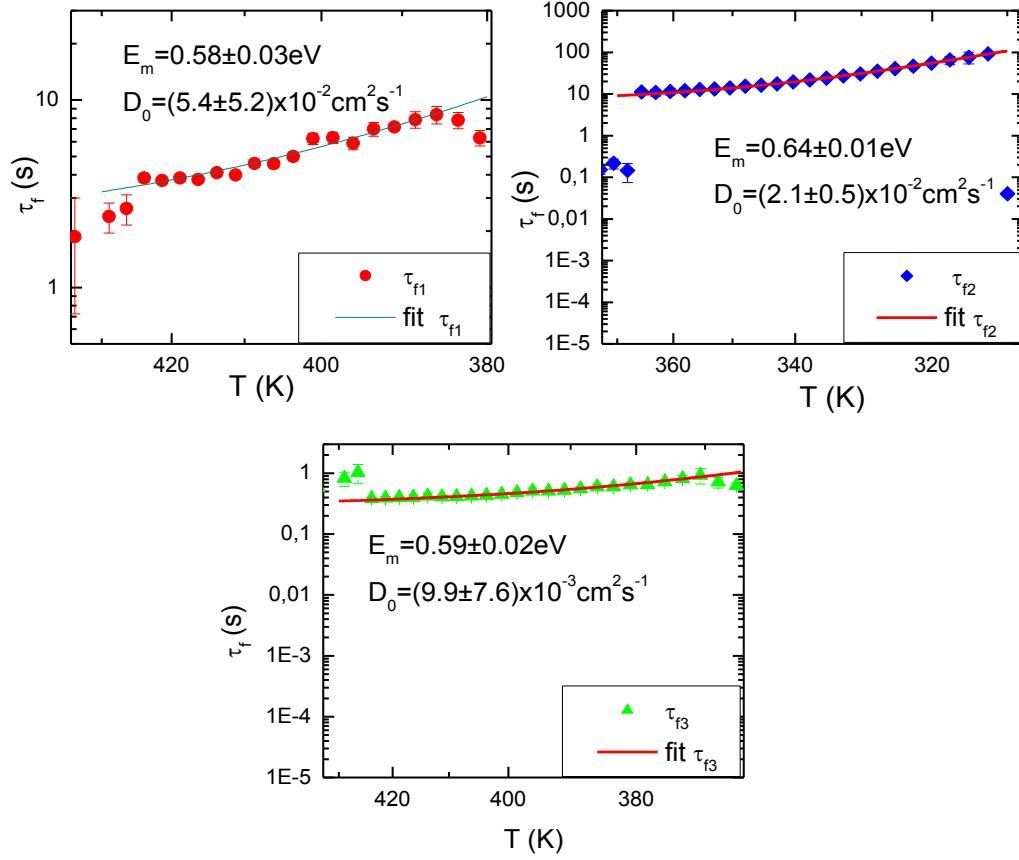


Şekil 4.1.9: TIDIF sinyallerine ait ΔC maksimum kapasite değişimleri-sıcaklık verileri: Veriler, 080313diode11Su adlı numune üzerinden alınmıştır. Deneysel verileri üç ekspanziyeye fit edilerek her bileşene karşılık gelen ΔC maksimum kapasite değişimleri elde edildi. Ölçüm koşulları: $V_r = -6.5V$, $V_f = -0.5V$, $t_r = 16s$, $t_d = 4s$.

Şekil 4.1.9'da görüldüğü gibi 300K ile 470K arasında demir difüzyonu üç fazlıdır. Bu durum Bölüm 2.2'de anlatıldığı gibidir: Birinci faz yaklaşık olarak 300K ile 365K, ikinci faz yaklaşık 360K-435K arasındır. Üçüncü faz yaklaşık 450K'den başlar, fakat bu sıcaklıklarda diyotların uzun süre (20-30dakika) tavlama işlemi diyotların bozulmasına neden olduğundan, mevcut deney koşullarında bu faz ile ilgili veri toplamak mümkün değildir. Bu fazda Bölüm 2.1'de anlatıldığı gibi hem Fe_i^+ hem de $Fe_i^+ B_s^-$ çiftlerinin sayısı azalmaktadır ve demir Fe_i^0 yük durumuna geçer. Deneysel verilerde yaklaşık 435K'den sonraki sıcaklıklarda TIDIF sinyalleri (geri difüzyon kapasite geçişleri) küçülür. Bu hem demirin deplasyon bölgesinin dışına, yani bulkün içine difüze olması hem de demirin nötr yük durumuna geçmesinden kaynaklanır. Ayrıca sinyallerin (TIDIF ve TID) şekilleri de bozulmaya başlar. Üçüncü fazda burada geliştirilen model

çalışmamaktadır. Dolayısıyla yüksek sıcaklıklarda analiz yapmak için farklı bir yöntem ihtiyacı vardır. Fazların geçiş bölgesinde veriler üstel davranış göstermezler ve verileri geçiş bölgelerinde bir fonksiyona fit edip analiz yapmak ve modellemek çok zordur. Şekil 4.1.9'daki maksimum kapasite değişimleri (4.1.1) eşitliğinden de görülebileceği gibi zamana bağlı üstel fonksiyonların katsayılarıdır. Maksimum kapasite geçişlerine karşılık gelen üstel fonksiyonların zaman sabitleri analiz edilerek difüzyon katsayısı ve difüzyon enerji bariyeri bulunur.

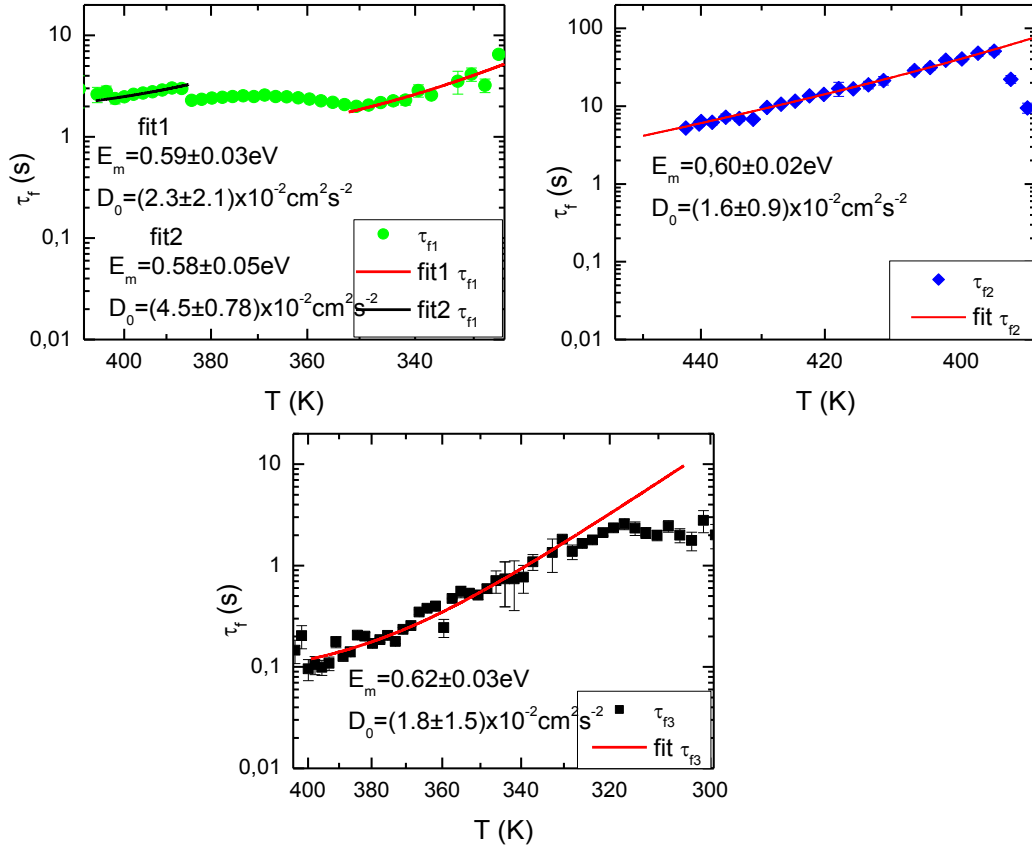
Şekil 4.1.10, Şekil 4.1.9'da TIDIF verilerine ait maksimum kapasite değişimleri verilen numuneye ait sıcaklığa bağlı TIDIF (τ_f) zaman sabitlerini göstermektedir. Her zaman sabiti aynı numaralı maksimum kapasite değişimine karşılık gelmektedir; örneğin τ_{f1} zaman sabiti ΔC_1 maksimum sığa değişimine karşılık gelir, v.b. TIDIF zaman sabiti-sıcaklık verileri (3.40) eşitliğine fit edilerek difüzyon katsayısı ön-üsteli ve difüzyon enerji bariyeri bulunur. Şekil 4.1.9'da 340K civarında ΔC_1 bileşenindeki dip Fe_i^+ 'nin difüzyonuna dair bilgi vermediği yukarıda açıklandı ve Şekil 4.1.10'da birinci bileşende 380K-430K arasında Fe_i^+ difüzyon katsayısı ön-üsteli ve difüzyon enerji bariyeri sırasıyla $D_0 = (5.4 \pm 5.2) \times 10^{-2} cm^2 s^{-1}$ ve $E_m = 0.58 \pm 0.03 eV$ olarak belirlendi. Numune ölçüm alınmadan önce 170°C'de 45 dakika tavlandığından 300K-365K arasında Fe_i^+ difüzyonu gözlenmektedir. İkinci bileşende 310K-365K arasında Fe_i^+ difüzyonu gözlenmektedir. İkinci bileşendeki τ_{f2} , zaman sabitinin büyük olması pozitif demirin difüze olurken negatif yüklü borona yakalandığına işaret eder. Bu bileşende $D_0 = (2.1 \pm 0.5) \times 10^{-2} cm^2 s^{-1}$ ve $E_m = 0.64 \pm 0.01 eV$ bulunur. Üçüncü bileşen 380K-435K arasında gözlenmektedir; difüzyon katsayısı ön-üsteli ve difüzyon enerji bariyeri sırasıyla $D_0 = (9.9 \pm 7.6) \times 10^{-3} cm^2 s^{-1}$ ve $E_m = 0.59 \pm 0.02 eV$ bulunur. 370K-435K arasında Fe_i^+ difüzyonuna ait iki farklı TIDIF zaman sabiti bu sıcaklık aralığında demir difüzyonu için iki mekanizmanın bulunduğunu gösterir. Bu sıcaklık aralığında Şekil 4.1.10'daki τ_{f1} zaman sabiti hem zaman sabitinin daha büyük olmasını, hem de difüzyon katsayısı ön-üstelinin büyük olması nedeniyle demirin geri difüze olurken tuzaklandığını göstermektedir. τ_{f3} TIDIF zaman sabiti ise demirin serbest difüzyonunu göstermektedir.



Şekil 4.1.10: Zaman sabiti-sıcaklık verileri: Şekil 4.1.9'daki ΔC_1 , ΔC_2 ve ΔC_3 bileşenlerine ait zaman sabitlerinin sıcaklığa bağlı değişimidir. Ölçüm koşulları: $V_r = -6.5V$, $V_f = -0.5V$, $t_f = 16s$ ve $t_d = 4s$. Zaman sabitlerinin genliklerinin farklı olması demirin difüze olurken farklı etkileşimlerde bulunduğunu göstermektedir. Grafiğin zaman sabiti eksenini log10 skalasında ve sıcaklık eksenini $1/T$ skalasında.

Şekil 4.1.11'de 080313diodeSu5 adlı numuneye ait zamana bağlı kapasite geçişlerinden elde edilen TIDIF zaman sabiti sıcaklık verileri gösterilmiştir. Diyoda 16 saniyelik toplam puls periyodu süresince $t_d = 3.2$ saniye boyunca $V_r = -7V$ ters gerilim uygulanmıştır ve $t_f = 12.8$ saniyelik geri difüzyon periyodu boyunca diyot $V_f = -1$ düzlenme gerilimine maruz bırakılmıştır. Bu numune için yine üç farklı TIDIF zaman sabiti elde edildi. Şekil 4.1.11'de τ_{f1} zaman sabitinde dört farklı bölge mevcuttur. 330-345K arasında zaman sabiti sıcaklıkla azalıyor. Numune 433K'de 45 dakika tavlандığından bu sıcaklık aralığında demir difüzyonu gözleniyor, fakat 370K'ye kadar demir-boron çift oluşumu arttığından zaman geçtikçe demir iyonları daha çok boron iyonlarına bağlanırlar ve bunun sonucunda yaklaşık 350-385K arasında TIDIF zaman sabiti artar. 385-410K arasında tekrar zaman sabiti azalır. τ_{f1} zaman sabitinden

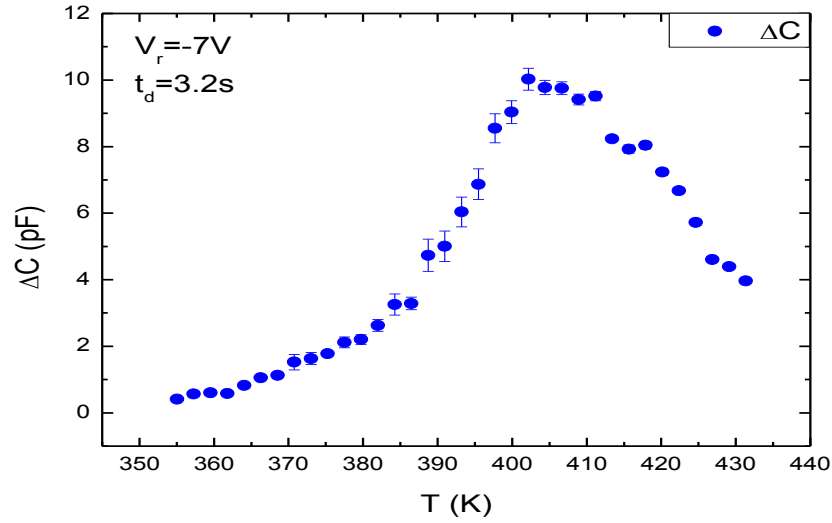
difüzyon sabiti ön-üsteli ve difüzyon enerji bariyeri için ortalama $D_0 = (3.4 \pm 0.44) \times 10^{-2} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ ve $E_m = 0.59 \pm 0.04 \text{eV}$ değerleri bulunur. Şekil 4.1.11'de τ_{f2} TIDIF zaman sabiti için $D_0 = (1.6 \pm 0.9) \times 10^{-2} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ ve $E_m = 0.60 \pm 0.02 \text{eV}$ değerleri elde edilir. τ_{f3} TIDIF zaman sabitine $D_0 = (1.8 \pm 1.5) \times 10^{-2} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ ve $E_m = 0.62 \pm 0.03 \text{eV}$ değerleri karşılık gelir. Demir difüzyonu için TIDIF analizlerinden difüzyon katsayısı ön-üsteli için ve difüzyon enerji bariyeri için sırasıyla ortalama $D_0 = (2.67 \pm 1.68) \times 10^{-2} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ ve $E_m = 0.60 \pm 0.03 \text{eV}$ değerleri elde edilir. Bu sonuçlar, Bölüm 3.3'de yapılan simülasyonlarla uyumludurlar.



Şekil 4.1.11: 080313diode5Su adlı numuneye ait zaman sabiti-sıcaklık verileri: Ölçüm koşulları: $V_r = -7 \text{V}$, $V_f = -1 \text{V}$, $t_f = 12.8 \text{s}$ ve $t_d = 3.2 \text{s}$. Burada Şekil 4.1.10'dan farklı olarak τ_{f1} TIDIF zaman sabitinde farklı üç bölge mevcuttur. Bu, pozitif yüklü demir iyonlarının ortamdaki negatif boron iyonlarıyla 370K'ye kadar giderek artan oranda çift oluşturduğunu gösterir. Grafiğin zaman sabiti ekseninde log10 skalasında ve sıcaklık ekseninde $1/T$ skalasındadır.

TIDIF modelinden elde edilen sonuçların TID modelinden elde edilen sonuçlarla uyumlu olması ve iki modelin birbirini tamamlaması gerekir. Şekil 4.1.12,

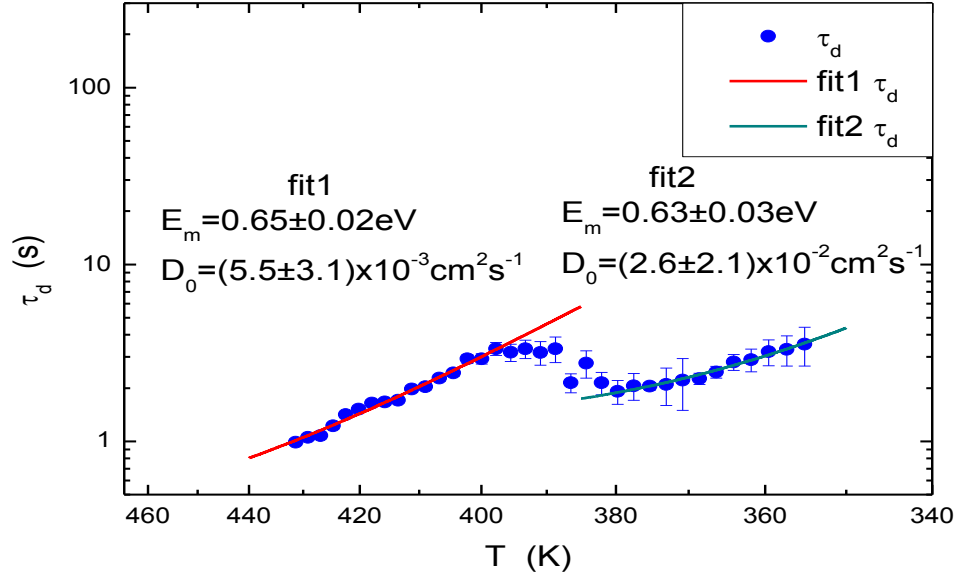
080313diode5Su adlı numuneye ait zamana bağlı TID kapasite geçişlerinin (ters gerilim altında zamana bağlı kapasite geçişlerinin) tek bileşenli zamana bağlı bir ekponansiyel fonksiyona fit edilmesi ile elde edilen TID pikini göstermektedir. TID piki (4.1) eşitliğinde üstel ifadenin önündeki katsayılardan (maksimum kapasite değişimlerinden) oluşur.



Şekil 4.1.12: 080313diode5Su adlı numuneye ait TID piki: -7V ters gerilim altındaki numunede pozitif demirin deplasyon bölgesinin sonuna doğru sürüklenmesinden dolayı 405K civarında maksimum kapasite geçişi gözlenir. Bu numunede 355K'den düşük sıcaklıklarda TID geçişleri gözlenmemiştir.

Şekil 4.1.13'de aynı numuneye ait TID zaman sabiti-sıcaklık verileri verilmektedir. 355K-435K sıcaklık aralığında iki ayrı TID zaman sabiti görülmektedir. Bu veriler $\alpha = \beta = 1$ alınarak (3.18) eşitliğine fit edilerek difüzyon katsayısı ön-üsteli ve difüzyon enerji bariyeri bulunmuştur. 355K-385K aralığındaki zaman sabiti demir-boron çifti oluşumunun baskın olduğu bölgededir. Bu sıcaklık aralığında pozitif demir deplasyon bölgesinin sonuna doğru sürüklenirken negatif boron atomlarına yakalandığında dolayı demir iyonlarının difüzyonu çift oluşturma reaksiyonu ile sınırlıdır. Demir-boron çifti oluşumu 370K'ye kadar arttığından dolayı, eğer numune daha önce 430K ve üstü sıcaklıklarda tavlınmamışsa, 370K'ye kadar olan sıcaklıklarda pozitif demirin difüzyonunu görmek için ters gerilim periyodunun çok uzun olması gerekir. Bu Bölüm 3.3'de Şekil 3.3.1(b) ve Şekil 3.3.1(d)'de gösterildi. Eğer numune yukarıda belirtilen sıcaklıklarda tavlınmış ise ortamda yeterince serbest demir iyonu oluşur ve 300K-370K

aralığında pozitif demirin uygulanan ters gerilim altında sürüklenmesi gözlenebilir. Burada 382K-390K arasında artan sıcaklıkla TID zaman sabitinin arttığı görülüyor. 390K-435K arasında serbest pozitif demirin oranı artar ve ters gerilim altında sürüklenen pozitif demirin miktarı ve hızı artar. 440K'e doğru pozitif demirin zaman sabitinin çok hızlandığı görülüyor. TID zaman sabitinin (3.18) eşitliğine fit edilmesi ile difüzyon katsayısı ön-üsteli ve difüzyon enerji bariyeri için ortalama $D_0 = (1.68 \pm 1.21) \times 10^{-2} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ ve $E_m = 0.64 \pm 0.03 \text{eV}$ değerleri elde edilir. Bu değerler yukarıda TIDIF yöntemiyle bulunan değerlerle ve Bölüm 3.3'de yapılan simülasyonlarla uyumludur.

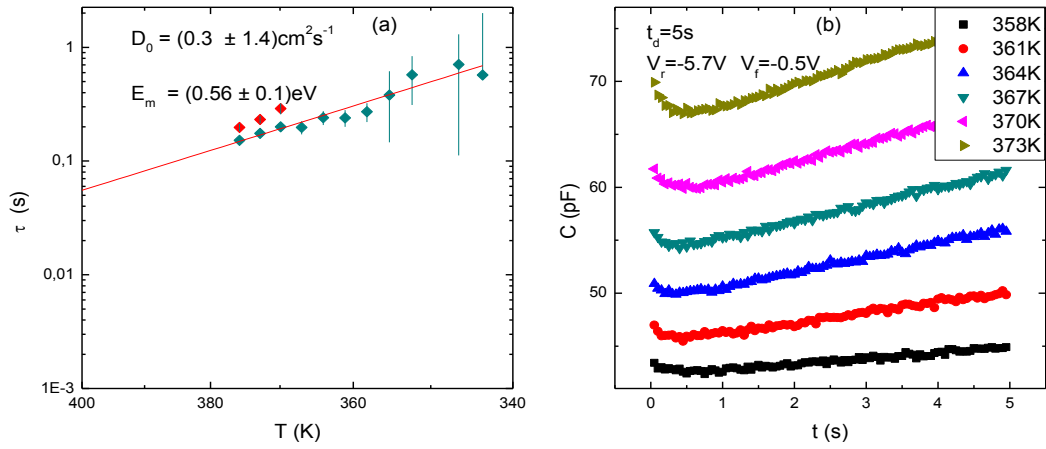


Şekil 4.1.13: TID zaman sabiti-sıcaklık verileri: $t_d = 3.2 \text{s}$ 'lik periyoda sahip $V_r = -7 \text{V}$ ters gerilim altında pozitif demirin deplasyon bölgesinde sürüklenmesi sonucu meydana gelen zamana bağlı kapasite geçişinin zaman sabiti iki kısımdan oluşur.

Bu, verilen sıcaklık aralığında demir iyonlarının sürüklenmesinin düşük sıcaklıklarda demir-boron çiftlerinin oluşumu ile sınırlandırıldığı ve yüksek sıcaklıklarda oluşan çiftlerin ayrışması ile difüzyonun arttığını gösterir. Grafğin zaman sabiti eksenini \log_{10} skalasında ve sıcaklık eksenini $1/T$ skalasında.

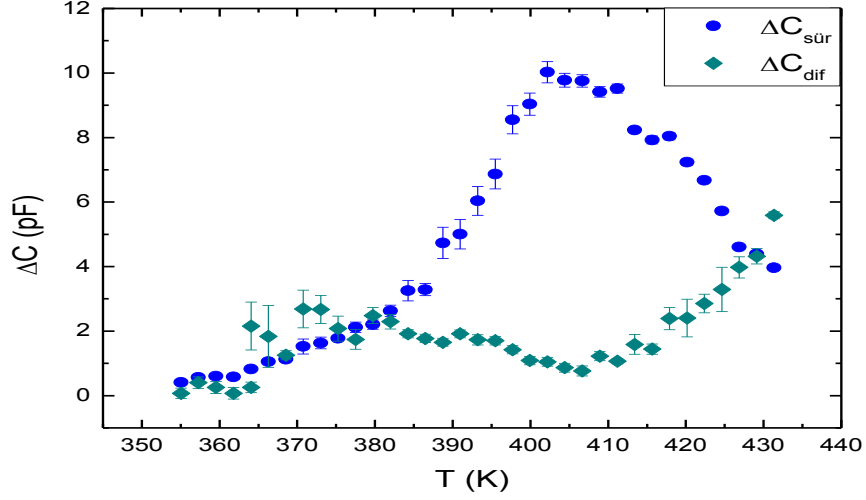
Bölüm 3.3'de yapılan simülasyonlarda, TID kapasite geçişlerinde gözlenen kapasite derinlik hassasiyetinin sıcaklıkla azaldığı gözlenmektedir. Yapılan deneylerde, TID kapasite geçişlerindeki kapasite derinlik hassasiyetine tekabül eden üstel olarak azalan bileşenin analizi sonucunda elde edilen zaman sabiti-sıcaklık verileri Şekil 4.1.14'de

verilmektedir. Zaman sabitinin sıcaklıkla değişimi, simülasyonlarda gözlenen kapasite derinlik hassasiyetine ait ve Şekil 3.3.6'da azalan bileşen ile verilen zaman sabiti ile uyum içindedir. Şekil 4.1.14'deki zaman sabiti sıcaklık verilerinin (3.18) eşitliğine fit edilmesi ile pozitif demirin difüzyon enerjisi, $E_m = 0.56 \pm 0.1\text{eV}$ ve difüzyon katsayısı ön-üsteli için $D_0 = (0.3 \pm 1.4)\text{cm}^2\text{s}^{-1}$ değeri bulunur. Burada difüzyon katsayısının ön-üsteli deneylerde bulunan diğer değerlerden bir mertebe daha büyüktür. Bu durum, difüzyon katsayısının kapasite derinlik hassasiyeti bölgesinde, deplasyon bölgesinin konumuna bağlı olmasıyla açıklanabilir.



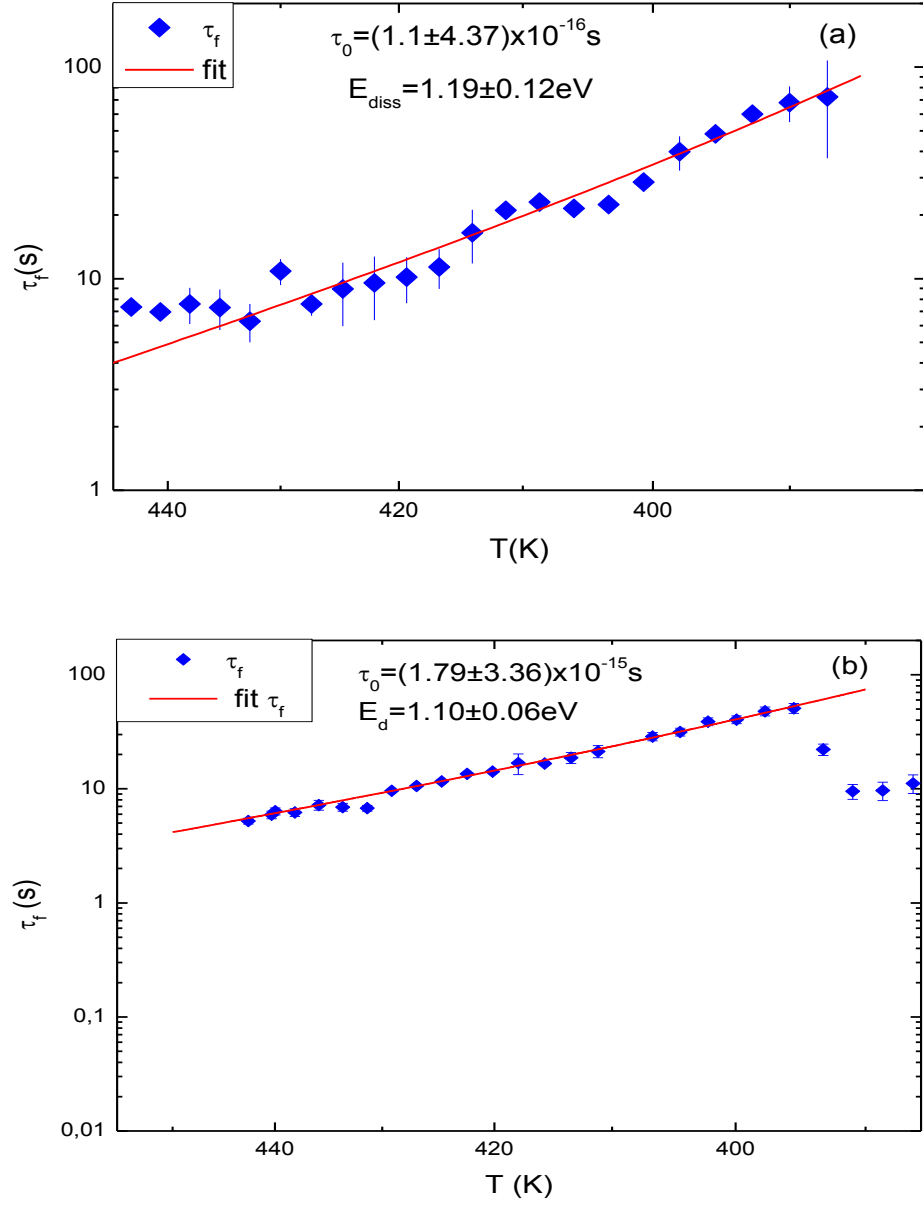
Şekil 4.1.14: Kapasite derinlik hassasiyetine tekabül eden zaman sabiti: (a) TID kapasite geçişlerinin erken zamanlarında görülen kapasite derinlik hassasiyetine tekabül eden zaman sabitinin sıcaklıkla değişimi. Grafiğin zaman sabiti ekseninde log10 skalasında ve sıcaklık ekseninde $1/T$ skalasında. (b), (a)'da verilen zaman sabitinin ait olduğu kapasite geçişleri. Deney koşulları: $t_d = 5\text{s}$, $t_f = 20\text{s}$, $V_r = -5.7\text{V}$, $V_f = -0.5\text{V}$.

Eşitlik (4.1.1)'de gösterildiği gibi her biri ait olduğu üstelin önündeki katsayıya denk gelen TIDIF ve TID pikleri sırasıyla geri difüze olan ve ters gerilim altında sürüklenen pozitif yüklü demir iyonlarının konsantrasyonları ile orantılıdır. Şekil 4.1.15'de 080313diode5Su numunesinin Şekil 4.1.12'de gösterilen TID piki (noktalar) ve Şekil 4.1.11'de τ_{f2} zaman sabitine sahip ekponansiyelin önündeki maksimum kapasite değişimlerinin sıcaklık dağılımını gösteren TIDIF dibi (dörtgenler) gösterilmektedir. Verilerin pik ve dip noktaları aynı sıcaklığa denk düşmektedir. Bu, demir iyonları hiçbir etkileşimde bulunmadan, sadece elektrik alan altında sürüklenip elektrik alan kaldırıldığında geri difüze olmaları halinde, maksimum miktarda demir iyonunun sürüklenmesine karşılık maksimum miktarda demir iyonunun geri difüze olduğunu gösterir.



Şekil 4.1.15: TID piki ve TIDIF piki: Mavi noktalar TID pikini ve koyu siyan dörtgenler TIDIF dibini göstermektedirler. Bu veriler 080313diode5Su numunesi üzerinden toplanan zamana bağlı kapasite geçişi verilerinin eksponansiyel fonksiyonlara fit edilmesi ile elde edilmiştir. TIDIF verileri üç, TID verileri ise tek eksponansiyele fit edildi.

Bölüm 3.3’de oluşturulan model, p-tipi silikonda pozitif yüklü demirin ters gerilim altında sürüklenmesini, ters gerilim kaldırıldığında geri difüzyonunun ve ortamda bulunan boron iyonları ile çift oluşturmasını ve bu çiftlerin ayrışmasını içeriyor. Bölüm 3.3’deki modeli betimleyen denklemlerin nümerik çözümlerinde, demir-boron çiftlerinin τ_{diss} , ayrışma zaman sabit için $\tau_{diss} = \tau_0 \exp(-E_d/k_B T)$ ifadesi kullanılarak τ_0 için 10^{-15} - 10^{-19} s mertebesinde değerler ve E_d için 1.15eV-1.22eV arasında değerler kullanıldı. Ters gerilim altında iyonların sürüklenme zaman sabitini veren (3.18) eşitliği ve ters gerilim kaldırıldığında iyonların geri difüzyon zaman sabiti tanımlayan (3.40) eşitliği kullanılarak deney verilerinden, demir-boron çifti ayrışma sabiti ön-üsteli τ_0 ’ın ve demir-boron çifti ayrışma enerjisi E_d ’nin deneysel değerleri bulunabilir. Şekil 4.1.16’de iki farklı numune için bulunan kapasite geçişleri verilerinin üstel fonksiyonlara fit edilmesi ile elde edilen difüzyon zaman sabit-sıcaklık verilerine (3.40) eşitliğinin fit edilmesi ile bulunan τ_0 ve E_d değerleri verilmektedir. Şekil 4.1.16(a)’da $\tau_0 = (1.10 \pm 4.37) \times 10^{-16}$ s ve $E_d = 1.19 \pm 0.12$ eV değeri bulunurken, Şekil 4.1.16(b)’de $\tau_0 = (1.79 \pm 3.36) \times 10^{-15}$ s ve $E_d = 1.10 \pm 0.06$ eV değerleri elde diliyor.



Şekil 4.1.16: Demir-boron çifti ayrışma sabitleri: (a)'da 080313diode8Su adlı numuneye difüzyon zaman sabiti sıcaklık verilerinin (3.40) eşitliğine fit edilmesi ile elde edilen τ_0 , demir-boron çifti ayrışma zaman sabiti ön-üsteli ve E_d demir-boron çifti ayrışma enerjisini gösterilmektedir. Bu fit için $E_m = 0.64 \text{ eV}$ ve $D_0 = 5.57 \times 10^{-2} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ alındı ve numunenin deney koşulları $V_r = -7.4 \text{ V}$, $V_f = -0.6 \text{ V}$, $t_d = 8 \text{ s}$ ve $t_f = 32 \text{ s}$ 'dir. (b) 080313diode5Su adlı numune için bulunan difüzyon zaman sabiti-sıcaklık verilerinden elde edilen τ_0 ve E_d değerlerini gösterilmektedir. Bu fit için $E_m = 0.60 \text{ eV}$ ve $D_0 = 1.18 \times 10^{-2} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ alındı ve numunenin deney koşulları $V_r = -7 \text{ V}$, $V_f = -1 \text{ V}$, $t_d = 3.2 \text{ s}$ ve $t_f = 12.8 \text{ s}$ 'dir

Yukarıda yapılan TIDIF ve TID analizleri sonucunda p-tipi silikon içinde pozitif yüklü demirin difüzyon enerji bariyeri için $E_m = 0.62 \pm 0.03\text{eV}$ değeri ve difüzyon katsayısı ön-üsteli için ortalama $D_0 = (2.18 \pm 1.45) \times 10^{-2}\text{cm}^2\text{s}^{-1}$ değeri bulundu. Demir-boron ayrışma zaman sabiti ön-üsteli için ortalama $\tau_0 = (8.32 \pm 9.37) \times 10^{-16}\text{s}$ ve demir boron çifti ayrışma enerjisi için ortalama $E_d = 1.16 \pm 0.09\text{eV}$ değerleri bulundu. Bu değerler Bölüm 3.3'de yapılan simülasyonlarla son derece uyumludurlar.

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Çalışma kapsamında yarı-iletkenlerde kusurların difüzyonu incelemek için geliştirilen TID metodunun bir türevi olan TIDIF metodu ile pozitif yüklü demirin p-tipi silikon içindeki difüzyonu deneysel olarak incelenerek, difüzyon katsayısı ve difüzyon enerji bariyeri için deneysel sonuçlar elde edildi. TID ve TIDIF modelleri p-tipi silikon içinde bakırın difüzyonunu iyi bir şekilde açıklamalarına [36, 38, 40, 42, 47, 48] rağmen p-tipi silikon içinde demirin difüzyonuna ilk kez uygulandılar. Bakır silikon içinde daima pozitif çözünür ve çok hızlı difüze olur [38, 40, 47]. Pozitif yüklü bakır p-tipi silikonda ortamdaki negatif yüklü katkılarla çiftler oluştur ve bu çift oluşturma süreci difüzyon mekanizmasını etkiler. TID modelinde yapılan iyileştirmelerle bakırın negatif yüklü katkılarla yaptığı çiftlerin bakır difüzyonuna etkisi hesaplanabiliyor [38, 40, 41, 47]. Demirin p-tipi silikonda difüzyonu Bölüm 2.1’de anlatıldığı gibi 300K-630K sıcaklık aralığında dört farklı difüzyon mekanizmasına sahiptir. Bu difüzyon mekanizması göz önüne alınarak TID modeli ve TIDIF modeli p-tipi silikon içinde pozitif yüklü demir iyonlarının difüzyonu için yeniden ele alındı. Bölüm 3.3’de p-tipi silikon içinde demirin sürüklenmesini ve difüzyonunu (TID ve TIDIF modelleri) içeren bir model geliştirilerek, bu modeli tasvir eden diferansiyel denklemler nümerik olarak çözüldü. Bu çözümlerin simülasyonları yapılan deneylerin verileri ile uyumlu olduğu görüldü. Nümerik çözümlerin sonuçları göz önüne alınarak deney verilerinin analizi için TID modeli için Referans [41]’daki model kullanıldı ve TIDIF modeli de Bölüm 3.3’de belirtildiği gibi demir-boron çiftlerinin etkisini hesaba katacak şekilde değiştirildi

4. Bölüm’de demir katkılanan boron katkılı p-tipi Schottky diyotunun TIDIF ve TID verilerinin analiz sonuçları verildi. Sabit sıcaklıkta bir Schottky diyoduna farklı ters gerilimlerde Şekil 3.1.1’deki gibi bir puls uygulanarak toplanan zamana bağlı kapasite geçişi verilerinin analizleri yapıldı. Şekil 4.1.8’de gösterilen TIDIF zaman sabiti-ters gerilim verileri, modelin ön gördüğü gibi TIDIF zaman sabitinin uygulanan ters gerilimle doğru orantılı olduğunu gösterir ve bu doğrulardan demirin efektif difüzyon katsayısı belirlenir. Burada 334K’de pozitif demir için efektif difüzyon katsayısı $D_{eff} = 2.205 \times 10^{-10} \pm 1.495 \times 10^{-11} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ bulunur; bu sonuç, yapılan nümerik

çözümle uyum içindedir. Sıcaklık taranarak, numuneye Şekil 3.1.1'deki gibi sabit bir gerilim pulsu uygulanarak toplanan zaman bağlı kapasite verileri 4. Bölümde anlatıldığı gibi analiz edildi. TIDIF ve TID verilerinin analizi ile p-tipi silikonda pozitif yüklü demirin difüzyon enerji bariyeri ve difüzyon katsayısı ön üsteli için sırasıyla, $E_m = 0.62 \pm 0.03\text{eV}$ ve $D_0 = (2.18 \pm 1.45) \times 10^{-2}\text{cm}^2\text{s}^{-1}$ değerleri bulunur

Çalışmada kullanılan numuneler $2 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$ mertebesinde boron katkılanmış p-tipi silikon pullardan yapıldı. Demir, boron katkılanmış silikon içinde pozitif çözünür, fakat 370K'ye kadar artan oranda ortamdaki negatif yüklü boron iyonları ile çift oluşturur [13, 14]. Numuneler 430K-470K aralığındaki sıcaklıklara en az yarım saat tavlansız yapılan deneylerde 360K'e kadar olan sıcaklıklarda pozitif demirin difüzyonuna ait kapasite geçişleri gözlenmedi. Özellikle de deneyin ters gerilim periyodunda (ters gerilimin uygulandığı kısım: Şekil 3.1.1) kapasite geçişleri (TID sinyalleri) yaklaşık 370K'e kadar gözlenmedi. Ters gerilim uygulandığında, 300K-370K sıcaklık aralığında TID sinyalinin görülmemesi, bu sıcaklık aralığında uygulanan ters gerilim altında bir kapasite geçişine yol açacak kadar demir iyonlarının serbest olmadığını gösterir. Bölüm 3.3'de yapılan simülasyonlarda Şekil 3.3.2'de sıcaklığa bağlı toplam demir konsantrasyonu-derinlik profilinde, bu sıcaklıklarda uygulanan ters gerilim altında pozitif demir iyonlarının deplasyon bölgesinin sonuna sürüklenmedikleri görülmektedir ve Şekil 3.3.8'de bu profillere karşılık gelen kapasite geçişlerinin negatif yönde olduğu görülmektedir. Bu sonuçlar Şekil 4.1.3 ve Şekil 4.1.4 deney verilerinde doğrulanıyor.

Deneylerde kullanılan numuneler 440K-470K aralığında en az yarın saat tavlansız demir iyonları boron iyonlarıyla yaptıkları çiftlerden ayrılırlar ve ortamdaki serbest demir iyonları arttığında düşük sıcaklıklarda TID sinyalleri gözlenir. Bu durum Şekil 4.2.3'de verilen deney verilerinden açıkça görülür. Demir iyonlarının ortamdaki boron iyonları ile çift yapma oranı 370K'ye kadar arttığı için tavlansız örneklerde difüze olan demir iyonları boron iyonlarına yakalanırlar. Bunu kapasite geçişlerinde görmek mümkündür: Şekil 4.1.12'de TID pikinin düşük sıcaklıklardaki kısmı ve yüksek sıcaklık kısmı simetrik değildir ve her iki kısmın değişimi farklıdır. Düşük sıcaklık kısmında yavaşlayan bir artış gözükürken yüksek sıcaklık kısmındaki düşüş çok hızlıdır.

Deneyin geri difüzyon periyodunda (TIDIF periyodunda) tavlansız ve tavlansız numunelerde 300K'de dahil olmak üzere TIDIF sinyalini görmek mümkündür. Bu

kapasite geçişinin sıcaklık eksenindeki pik yeri uygulanan pulsun periyoduna göre değişir. Bu pik, numuneye 1 saniyelik bir puls uygulandığında 340K civarına ve daha büyük periyotlu pulslar uygulandıkça 355K'e doğru kayar. Şekil 4.1.9'da toplam 20 saniyeli puls periyoduna sahip sinyalde ΔC_1 kapasite değişiminde yaklaşık 345K'de meydana gelen pik, bahsi geçen TIDIF sinyaline aittir. Ayrıca sıcaklık arttıkça, bu sinyale karşılık gelen zaman sabiti de artar. Deneyleerde bu sıcaklıklarda tavlanmamış numunede pozitif demirin ters gerilim altında sürüklenmediği gözlemlendiğinden, bu sinyal ters gerilim altında deplasyon bölgesinin sonuna sürüklenen demir iyonlarının geri difüzyonu ile ilgili değildir. Bu sinyalin zaman sabiti sıcaklıkla arttığından dolayı bu çalışmadaki modellerle analizi ve kaynağını belirlemek mümkün değildir.

TIDIF sinyalleri birden fazla ekponansiyeye fit olurlar. Bu ekponansiyelerden biri mutlaka yukarıda bahsi geçen sinyaldir. Diğer bileşen (veya bileşenler) demir difüzyonuna karşılık gelirler. Tavlanmış örneklerde Şekil 4.1.11'deki deney verilerinin analizinde gösterildiği gibi demirin geri difüzyonu gözlenmektedir. 370K'den sonra demir iyonları ortamdaki negatif yüklü iyonlarla yaptıkları çiftlerden ayrıştıkları için demir difüzyonu artmaktadır. Şekil 4.10 ve Şekil 4.11'de görüldüğü gibi 360K'den sonraki sıcaklıklarda en az iki TIDIF sinyali (en az iki zaman sabiti) mevcuttur. Bu durum pozitif demirin difüzyonu için 360-440K arasında en az iki difüzyon mekanizması olduğunu gösterir. 370K'den sonra p-tipi silikonda ortamdaki serbest demir iyonları boron iyonlarına yakalanmadan difüze olurlarken, diğer yandan da demir-boron çiftlerinin ayrışmasıyla serbest kalan iyonlar difüze olurlar. Düşük sıcaklıklarda ise demir iyonları difüze olurlarken boron iyonlarına yakalanıp çift oluştururlar, bu difüzyonu yavaşlatan bir süreçtir.

Bu çalışma, 300K-450K sıcaklık aralığında p-tipi silikonda demirin difüzyonu için TID modelinin başarı ile uygulanabileceğini ve TID modelinin bir türevi olan TIDIF modelinin de aynı şekilde uygulanabildiğini göstermiştir. Bu yöntemlerle bulunan difüzyon enerji bariyeri ve difüzyon katsayısı ön-üsteli literatürdeki sonuçlarla ve yapılan simülasyonlarla iyi bir uyum içindedir. Literatürde difüzyon enerji bariyeri için 0.45eV'den 0.92eV'ye kadar değişen çok farklı değerler mevcuttur. Bu çalışmada her iki yöntemle aynı değerlerin bulunması, demirin difüzyon enerji bariyerinin 0.62 ± 0.03 eV değerinin doğru bir değer olduğuna işaret eder.

Çalışmada ortaya çıkan önemli bir sonuç da demir-boron çiftinin ayrışma zaman sabiti hakkındaki verilerdir. Literatürde demir-boron çifti ayrışma enerjisi için 1.17eV [2], 1.40eV [34], 1.05eV [35] değerleri mevcuttur. Şekil 4.1.16(a) ve Şekil 4.1.16(b)'de bu çalışmada, elde edilen iki demir-boron çifti ayrışma enerjisi değeri, $E_d = 1.10 \pm 0.06\text{eV}$ ve $E_d = 1.19 \pm 0.12\text{eV}$ verilmiştir. Ayrıca Şekil 4.1.16(a) ve Şekil 4.1.16(b)'de demir-boron çifti ayrışma zaman sabiti ön üstelleri için $\tau_0 = (1.79 \pm 3.36) \times 10^{-15}\text{s}$ ve $\tau_0 = (1.10 \pm 4.37) \times 10^{-16}\text{s}$ değerleri elde edildi. Yapılan analizlerde τ_0 için ortalama $(8.32 \pm 9.37) \times 10^{-16}\text{s}$ değeri ve E_d için ortalama $1.16 \pm 0.09\text{eV}$ değeri bulundu.

435K'den daha yüksek sıcaklıklarda deşikler aktif hale gelirler ve pozitif demir deşik yayımlayarak nötr hale gelir [2, 13, 14]. 435K'den daha yüksek sıcaklıklarda TIDIF ve TID modellerinin çalışabilmesi için Bölüm 3.3'de nümerik olarak çözülen denklemlere $Fe_i^0 \rightleftharpoons Fe_i^+ + e^-$ reaksiyonun etkisini gösteren bir terim ekleyerek, denklemleri çözmek gerekir. Ayrıca deneylerde kullanılan örnekler 440K gibi yüksek sıcaklıklarda uzun süre kaldıklarında bozulurlar ve silikon yüzeyine alüminyum buharlaştırılarak yapılan Schottky kontaklar 470K'de uzun süre tavlandıklarında alüminyumun silikona difüze olmasıyla Ohmik kontağa dönüşürler. Dolayısıyla 440K'den daha yüksek sıcaklıklarda çalışmak için hem kullanılan örnekler hem de kullanılan Schottky kontaklar uygun değildir.

TID modelinde simülasyonlarda görülen kapasite derinlik hassasiyeti, Şekil 4.1.3, Şekil 4.1.4 ve Şekil 4.1.5'deki deney verilerinin ters gerilim uygulanan kısımlarında gözlenmektedir. Bölüm 3.3'de vurgulandığı gibi bu durum iyonların ters gerilim altında sürüklenmesinden kaynaklanan bir etkidir ve serbest taşıyıcıların ters gerilim altında sürüklenmelerinde gözlenmez. Deney verilerinde düşük sıcaklıklarda kapasite derinlik hassasiyetinin etkisinin büyük olduğu gözleniyor (Şekil 4.1.3, Şekil 4.1.4). Sıcaklık arttıkça ters gerilim periyodunun başlangıcında görülen kapasite azalmalarının genliği azalmaktadır. 370K'den sonraki sıcaklıklarda serbest demir iyonlarının hızlarının artması ile periyodun başlangıç kısmındaki kapasite azalması hızla azalmakta ve 390K civarında tamamen yok olmaktadır. Kapasite derinlik hassasiyeti zaman sabitinden pozitif demirin difüzyon enerji bariyeri $0.56 \pm 0.05\text{eV}$ olarak elde edildi. Bu değer, pozitif demir için bulunan ortalama değerle, deney hataları çerçevesinde uyumludur.

6. KAYNAKLAR

- [1] Istratov, A. A., Hieslmair, H., Weber, E. R., 2000, Iron Contamination in Silicon Technology *Applied Physics A*, 70, 489-534.
- [2] Istratov, A. A., Hieslmair, H., Weber, E. R., 1999, Iron and its Complexes in Silicon, *Applied Physics A*, 69, 13-44.
- [3] Greulich-Weber, S., Niklas, J. R., Weber, E. R., Spaeth, J. M., 1984, Electron Nuclear Double Resonance of Interstitial Iron in Silicon, *Physical Review B*, 30 (11), 6292-6299.
- [4] Woodbury, H. H., Ludwig, G. W., Spin Resonance of Transition Metals in Silicon, 1960, *Physical Review*, 117 (1), 102-108.
- [5] Beeler, F., Anderson, O. K., Scheffler, M., 1990, Electronic and Magnetic Structure of 3d Transition-Metal Point Defects in Silicon Calculated From First Principles, *Physical Review B*, 42 (3), 1603-1624.
- [6] Zunger, A., Lindefelt, U., Electronic Structure of Transition-Atom Impurities in Semiconductors: Substitutional 3d Impurities in Silicon, 1983, *Physical Review B*, 27 (2), 1191-1227.
- [7] Collins, C. B., Carlson, R. O., 1957, Properties of Silicon Doped with Iron or Copper, *Physical Review*, 108 (6), 1409-1414.
- [8] Feichtinger, H., Walzl, G., Gschwandtner, A., 1978, Localization the Fe^0 Level in Silicon, *Solid State Communications*, 27 (9), 867-871.
- [9] Wünstel, K., Wagner, P. 1982, Interstitial Iron and Iron-Acceptor Pairs in Silicon, *Applied Physics A*, 27, 207-212.
- [10] McHugo, S. A., McDonald, R. J., Smith, A. R., Hurley, D. L., Weber, E. R., 1998, Iron Solubility in Highly Boron-Doped Silicon, *Applied Physics Letters*, 73 (10), 1424-1426.
- [11] Gilles, D., Schroter, W., Bergholz, W., 1990, Impact of the Electronic Structure on the Solubility and Diffusion of 3d Transition Elements in Silicon, *Physical Review B*, 41 (9), 5770-5782.
- [12] Brotherton, S. D., Bradley, P., Gill, A., 1985, Iron and Iron-Boron Complex in Silicon, *J. Appl. Phys.*, 57 (6), 1941-1943.
- [13] Wijaranakula, W., 1993, The Reaction Kinetics of Iron-Boron Pair Formation and Dissociation in P-Type Silicon, *J. Electrochem. Soc.*, 140 (1), 271-281.

- [14] Kamiura, Y., Hashimoto, F., Yoneta, M., 1990, Effect of Heat-Treatments on Electrical Properties of Boron-Doped Silicon Crystals, *Journal of The Electrochemical Society*, 137 (11), 3642-3647.
- [15] Heiser, T., Mesli, A., 1991, How Far Does the Charge State Affect the Aron Behavior in Silicon?, *Applied Physics Letters*, 58 (20), 2240-2242.
- [16] Heiser, T., Mesli, A., 1992, Charge-State Diffusion and Carrier-Emission-Limited Drift of Iron in Silicon, *Physical Review Letters*, 68 (7) 978-981.
- [17] Weber, E. R., 1983, Transition Metal in Silicon, *Applied Physics A* 30, 1-22.
- [18] Kaniava, A., Gaubas, E., Vaitkus, J., Vanhellemont, J., 1995, Recombination Activity of Iron Related Complexes in Silicon, *Materials Science and Technology – London*, 11 (7), 670-675.
- [19] Koveshnikov, S. V., Rozgonyi, G. A., 1995, Iron Diffusivity in Silicon: Impact of Charge State, *Applied Physics Letters*, 66 (7), 860-862.
- [20] Rapoport, I., Taylor, P., Kearns, J., Schroder, D. K., 2010, Two-side Surface Photovoltage Studies for Implanted Iron Diffusion in Silicon During Rapid Thermal Anneal, *Journal of Applied Physics*, 107 (013518), 1-6.
- [21] Reiss, J. H., King, R. R., Mitchell, K. W., 1996, Characterization of Diffusion Length Degradation in Czochralski Silicon Solar Cells, *Appl. Phys. Lett.* 68 (23), 3302-3304.
- [22] Kimerling, L.C., Benton, J.L., 1983, Electronically Controlled Reactions of Interstitial Iron in Silicon, *Physica B+C*, 116,297-300.
- [23] Szawelska, H. R., Feichtinger, H., 1981, Energy Levels of Silicon Doped with Iron, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 14, 4131-4140.
- [24] Takahashi, H., Suezawa, M., Sumino, K., 1992, Charge-State-Dependent Energy for Diffusion of Iron in Silicon, *Physical Review B*, 46 (3), 1882-1885.
- [25] Gunnlaugsson, H. P., Dietrich, M., and ISOLDE Collaboratin, Fanciulli, M., Bharuth-Ram, K., Sielemann, R., 2002, Charge State Ddependence of the Diffusivity of Interstitial Fe in Silicon Detected by Mössbauer Spectroscopy, *Applied Physics Letters*, 80 (15), 2657-2659.
- [26] Istratov, A. A., Hieslmair, H., Weber, E. R., 1999, What Do We Know about Iron in Silicon after 45 yr of Research, *Physica B*, 273-274, 412-415.
- [27] Zhao, S., Assali, L. V. C., Justo, J. F., Gilmer, G. H., Kimerling, L. C., 2001, Iron-Acceptor Pairs in Silicon: Structure and Formation Processes, *Journal of Applied Physics*, 90 (6), 2744-2753.
- [28] Nakashima, H., Sadoh, T., Tsurushima, T., 1993, Hole Traps of Metastable Iron-Boron Pairs in Silicon, *J. Appl. Phys.*, 73 (6), 2803-2807.

- [29] Schmidt, J., Macdonald, D., 2005, Recombination Activity of Iron-Gallium and Iron-Indium Pairs in Silicon, *Journal of Applied Physics*, 97 (113712), 1-9.
- [30] Walz, D., Joly, J. P., Kamarinos, G., 1996, On the Recombination Behaviour of Iron in Moderately Boron-Doped p-type Silicon, *Appl. Phys. A*, 62, 345-353.
- [31] Reiss, H., 1956, Refined Theory of Ion Pairing. I. Equilibrium Aspects, *The Journal of Chemical Physics*, 25 (3), 400-407.
- [32] Hieslmair, H., Istratov, A. A., Heiser, T., Weber, E. R., 1988, Evaluation of Precipitate Densities and Capture Radii from the Analysis of the Precipitation Kinetics, *Journal of Applied Physics*, 84 (2), 713-717.
- [33] Reiss, H., Fuller, C. S., Morin, F. J., 1956, Chemical Interactions Among Defects in Germanium and Silicon, *The Bell System Technical Journal*, 35 (3), 535-636.
- [34] Hieslmair, H., Istratov, A. A., Flink, C., McHugo, S. A., Weber E. R., 1999, Experiments and Computer Simulations of Iron Profiles in p/p⁺ Silicon: Segregation and the Position of the Iron Donor Level, *Physica B*, 441-444.
- [35] Kolkovskiy, V. I., Merli, A., Dobaczewski, L., Abrosimov, N. V., Zytikiewicz, Z. R., Peaker, A. R., 2006, Interaction of Iron with the Local Environment in SiGe Alloys Investigated with Laplace Transform Deep Level Spectroscopy, *Physical Review B*, 74, 195204-1-195402-8.
- [36] Heiser, T., Weber, E. R., 1998, Transient Ion-Drift-Induced Capacitance Signals in Semiconductors, *Physical Review B*, 58 (7), 3893-3903.
- [37] Koveshnikov, S., Choi, B., Yarykin, N., Rozgonyi, G., 1999, Drift of Interstitial Iron in a Space Charge Region of p-type Si Schottky Diode, *Physica B*, 395-397.
- [38] Heiser, T., Mesli, A., 1993, Determination of the Copper Diffusion Coefficient in Silicon from Transient Ion-Drift, *Applied Physics A*, 57, 325-328.
- [39] Shockley, W., Read, W. Jr., 1952, Statistics of the Recombination of Holes and Electrons, *Physical Review* 87 (5), 835-842.
- [40] Celebi, Y.G., 1998, Copper Diffusion in Silicon, PhD Thesis, Texas Tech University.
- [41] Istratov, A. A., Flink, C., Hieslmair, H., Weber, E. R., 1998, Intrinsic Diffusion Coefficient of Interstitial Copper in Silicon, *Physical Review Letters*, 81 (6) 1243-1246.
- [42] Lyubomirsky, I., Rabinal, M. K., Cahen, D., 1997, Room-Temperature Detection of Mobile Impurities in Compound Semiconductors by Transient Ion Drift. *J. Appl. Phys.*, 81 (10), 6684-6691.
- [43] Mesli, A., Heiser, T., Amroun, N., Siffert, P., 1990, Charge-State-Dependent Iron Precipitation in Silicon, *Appl. Phys. Lett.*, 57 (18), 1898-1900.

- [44] Lauweart, J., Van Gheluwe, J., Clauws, P., 2008, An Accurate Analytical Approximation to the Capacitance Transient Amplitude in Deep Level Transient Spectroscopy for Fitting Carrier Capture Data, *Review of Scientific Instruments*, 79, 093902-1-093902-4.
- [45] Zundel, T., Weber, J., 1992, Trap-Limited Hydrogen Diffusion in Boron Doped Silicon, *Physical Review B*, 46 (4), 2071-2077.
- [46] Lang, D. V., 1974, Deep-Level Transient Spectroscopy: A New Method to Characterize Traps in Semiconductors, *Journal of Applied Physics*, 45 (7), 3023-3032.
- [47] Zamouche, A., Heiser, T., Mesli, A., 1995, Investigation of Fast Diffusing Impurities in Silicon by a Transient Ion Method, *Appl. Phys. Lett.* 66 (5), 631-633.
- [48] Heiser, T., McHugo, S., Hieslmair, H., Weber, E., R., 1997, Transient ion drift detection of low level copper contamination in silicon, *Appl. Phys. Lett.*, 70 (26), 3576-3578

7. ÖZGEÇMİŞ



Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı	Erdal ÇATAK
Uyruğu	T. C.
Doğum tarihi, Yeri	20/02/1982, Kiğı
E-mail	ecatak@istanbul.edu.tr

Eğitim

Derece	Kurum/Anabilim Dalı/Programı	Yılı
Doktora	İ.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü/Fizik Anabilim Dalı/Genel Fizik Programı	2013
Yüksek Lisans	Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü/Fizik Mühendisliği/	2006
Lisans	Ankara Üniversitesi Mühendislik Fakültesi/Fizik Mühendisliği	2003
Lise	Tuzla Kaşif Kalkavan Lisesi	1999

Makaleler / Bildiriler

Celebi Y. G., Lichti R., Baker B., Mengyan P., Bani-Salameh H., Çatak E., *Muonium dynamics in transparent conducting oxides*. Physica B 2879–2882, (2012)

Mengyan P. W., Lichti R. L., Celebi Y. G., Baker B. B., Carroll B. R., Catak E., Zawilski K. T., Schunemann P. G., *Magnetic Fields and Fluctuations in Weakly Mn Doped ZnGeP₂*, the AIP Conference Proceedings: the Proceedings of the 27th International Conference on Defects in Semiconductors (2013).

Baker B. B., Celebi Y. G., Lichti R. L., Mengyan P. W., Catak E., *Motional Characteristics of Positively Charged Muonium Defects in In₂O₃*, the AIP Conference Proceedings: the Proceedings of the 27th International Conference on Defects in Semiconductors (2013).

Mengyan P. W., Lichti R. L., Baker B. B., Celebi Y. G., Catak E., Zawilski K. T., Schunemann P. G., *Probing Local features in Dilute Magnetic Semiconducting ZnGeP₂: Mn via MuSR*, Bulletin of the American Physical Society 57, (2012)