

УРОВНИ ОБОБЩЕНИЯ КОНФИГУРАЦИЙ ДИВАКАНСИЙ В КРЕМНИИ ПРИ УЧАСТИИ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ

А.П. Долголенко

Институт ядерных исследований НАН Украины,

Киев, Украина

E-mail: odolgolenko@kinr.kiev.ua

Описано поведение подвижности электронов при их диффузном движении в высокоомном кремнии, выращенном методом бестигельной зонной плавки (Fz) и методом Чохральского (Cz), после облучения быстрыми нейтронами реактора и последующего отжига при комнатной температуре. В рамках диффузной модели рассчитана в кремнии температурная зависимость дрейфовых барьеров движения электронов в образцах в присутствии кластеров дефектов. Определены концентрации и энергетические уровни радиационных дефектов в проводящей матрице *n*-Si. Обоснована роль междузельных атомов кремния в гистерезисе температурной зависимости подвижности электронов как в их участии в конфигурационной перестройке дивакансий в кластерах дефектов, так и в образовании уровней обобщенных конфигураций.

ВВЕДЕНИЕ

Кластеры дефектов, созданные в полупроводниках быстрыми нейтронами реактора, характеризуются высокой концентрацией дефектов, значительной протяженностью пространственного заряда, вследствие чего они сильно влияют на кинетические коэффициенты, в частности, на подвижность носителей в кремнии, изменяя проводимость образцов.

К числу собственных дефектов, наиболее изученных в кремнии, можно отнести вакансии, междузельные атомы, дивакансии (V_2) и их комплексы с примесными атомами. Моливер С.С. [1] показал, что в кремнии дивакансия является дефектом с двухъямным потенциалом в нейтральном и заряженном состояниях, когда методом молекулярных орбиталей подтвердил результаты метода функционала плотности. В кремнии с решеткой типа алмаза дивакансии создают по шесть оборванных связей, являются амфотерными центрами и могут находиться в четырех или пяти зарядовых состояниях в зависимости от их конфигураций.

Одной из наиболее важных характеристик дефектов является энергия миграции. Так, авторы [2] сравнивали энергии миграции междузельного атома (I_{Si}) и пары Френкеля (I–V) относительно энергии миграции вакансии (V^{++} , 0,33; V^0 , 0,45; V^- , 0,18 эВ), измеренные Воткинсом [3]. Они показали, что энергия миграции (E_m) I_{Si} и I–V почти не отличаются от энергии миграции вакансий в соответствующих зарядовых состояниях. Исследование отжига кластеров дефектов (основными дефектами в них являются дивакансии и тривакансионные дефекты) позволило определить энергии активации их аннигиляции $E_a = 0,91$ эВ и $E_a = 0,74$ эВ с междузельными и дивакансионными атомами кремния [4]. Зная величину барьера ($E_b = 0,41$ эВ) [5], были определены энергии их миграции $E_{I_1}^m = 0,5$ эВ и $E_{I_2}^m = 0,33$ эВ при температуре ~ 100 °С.

Таким образом, и вакансия, и междузельный атом кремния в решетке кристалла могут двигаться только активационным способом, а энергия миграции зависит не только от зарядового состояния, но и от локализации дефекта в решетке.

Цель работы: на примерах экспериментального измерения температурного поведения подвижности электронов в кремнии, выращенном различными методами, показать роль междузельных атомов кремния в конфигурационной перестройке дивакансий в кластерах дефектов и их участие в обобщении конфигураций дивакансий.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В данной работе исследовались высокоомные образцы *n*-Si ($n_0 = (5,6 \dots 6,5) \cdot 10^{12}$ см⁻³), выращенные методами Чохральского и бестигельной зонной плавки, и образцы *n*-Si (Fz) ($n_0 = 1,56 \cdot 10^{14}$ см⁻³) после облучения $(2,5 \dots 5,4) \cdot 10^{12}$ и $3 \cdot 10^{13}$ н⁰·см⁻² флюенсами (Φ) быстрых нейтронов реактора соответственно. Облучение проводилось на горизонтальном канале реактора ВВР-М при комнатной температуре и потоке $5 \cdot 10^8$ н⁰/(см²·с). Поток быстрых нейтронов с точностью $\sim 10\%$ был определен пороговым детектором ³²S (пороговая энергия $E = 0,95$ МэВ) и приведен к энергии нейтронов начиная с ~ 100 кэВ согласно теоретическому спектру нейтронов. Измерения проводимости и коэффициента Холла были выполнены стандартным компенсационным методом с точностью ~ 1 и $\sim 3\%$ соответственно. Образцы *n*-Si измерялись после выдержки различное время при комнатной температуре с понижением и с обратным повышением температуры на образце в процессе измерения.

На рис. 1–3 показаны температурные зависимости кинетических коэффициентов *n*-Si, облученного быстрыми нейтронами реактора после отжига при комнатной температуре. В табл. 2–4 представлены результаты расчетов температурных зависимостей концентраций носителей: энергии и концентрации радиационных дефектов в проводящей матрице образцов. Определение концентрации носителя выполнено в рамках уточненной модели Госсика. Расчет температурной зависимости подвижности электронов и дрейфовых барьеров в проводящей матрице образцов *n*-Si был выполнен в рамках диффузной модели.

ТЕОРИЯ

Известно, что быстрые нейтроны образуют в кремнии, наряду с точечными дефектами, и их скопления, окруженные областями пространственного заряда. Свойства полупроводников с кластерами дефектов в качественном отношении отличаются от свойств тех же материалов с равномерно введенными простыми дефектами [6]. Известно, что кластеры дефектов равновероятно вводятся быстрыми нейтронами, поэтому геометрическое перекрытие учитывается экспоненциальным способом. Но с понижением температуры образца надо учитывать дополнительное перекрытие областей пространственного заряда кластеров дефектов [7].

Дополнительное перекрытие кластеров дефектов, обусловленное перезарядкой всех введенных точечных дефектов, можно учесть с помощью интеграла перекрытия [8]:

$$f = f_0 \exp(-\Sigma_1 V \Phi), \quad (1)$$

где Σ_1 – вероятность перекрытия кластеров дефектов, см^{-1} ; f_0 – доля объема, занятого кластерами дефектов, причем учитывается только геометрическое перекрытие объемов (V) кластеров дефектов, обусловленное статистическим законом взаимодействия быстрых нейтронов с атомами кристалла.

Так как процесс накопления изолирующего объема кластеров дефектов аналогичен закону накопления и распада радиоактивных ядер, то доля объема, занятого кластерами дефектов, равна

$$f = (1 - \exp(-\Sigma V \Phi)) \cdot \exp(-\Sigma_1 V \Phi). \quad (2)$$

Вероятность дополнительного перекрытия областей пространственного заряда кластеров значительно меньше вероятности образования кластеров: $\Sigma_1 \ll \Sigma$.

Исходя из уточненной модели Госсика для объема [9] получим эффективную концентрацию носителей (n_{Φ}) в зависимости от флюенса и температуры [10]:

$$n_{\Phi}(T, \Phi) = n(T, \Phi) \exp\left[-\frac{4\pi\epsilon_0 \Sigma R_1 \Phi}{N_2(T, \Phi) q^2} \left(\mu - kT \ln \frac{N_c(T)}{N_2(T, \Phi)}\right)\right], \quad (3)$$

где $N_2(T, \Phi)$ – концентрация экранирующих центров в областях пространственного заряда кластеров дефектов; μ – положение уровня Ферми в центре кластера относительно разрешенных зон кремния; $N_c(T)$ – эффективная плотность состояний в зонах; $n(T, \Phi)$ – концентрация носителей в проводящей матрице кремния; R_1 – средний радиус областей скопления дефектов; ϵ и ϵ_0 – диэлектрические постоянные материала и вакуума соответственно; q – заряд носителя тока.

С увеличением уровня легирования n -Si можно определить уровень Ферми в кластере:

$$\mu = E_c - 0,6 + 0,033 \log(n_0/n_i), \quad (4)$$

где n_0 – концентрация электронов в зоне проводимости n -Si до облучения, см^{-3} ; $n_i = 10^{10} \text{ см}^{-3}$ – концентрация носителей в собственном кремнии.

При повышении температуры образца от 77 К будем иметь некоторую концентрацию электронов в зоне проводимости за счет теплового возбуждения (ионизации) электронов с уровня E_a как в проводящей матрице $n(T, \Phi)$, так и в областях пространственных зарядов кластеров дефектов $N_2(T, \Phi)$. Из решения квадратичного уравнения, которое вытекает из условия электронейтральности [11], получим в определенном температурном интервале температурную зависимость концентрации электронов в образце:

$$n(T, \Phi, E_a) = \frac{1}{2} \left(N_d - \frac{N_a(\Phi)}{\lambda} - n_{11} \right) \left[\sqrt{1 + \frac{4N_d n_{11}}{\left(N_d - \frac{N_a(\Phi)}{\lambda} - n_{11} \right)^2}} + 1 \right];$$

$$n_{11} = g N_c(T) \exp\left(-\frac{E_a}{\lambda kT}\right), \quad (5)$$

где $g = 2$ – фактор вырождения акцепторного уровня; $N_a(\Phi)$ – концентрация радиационно-введенных акцепторных дефектов после облучения флюенсом (Φ); n_{11} – концентрация электронов в зоне проводимости n -Si, когда уровень Ферми совпадает с уровнем E_a в проводящей матрице или с эффективным уровнем E_a/λ в пространственно-заряженной области кластера дефектов.

Если акцепторный дефект находится в проводящей матрице, то $\lambda = 1$, а в случае его локализации в области пространственного заряда кластера – $\lambda = 1,5$.

Рассмотрим область температур ($T > 160$ К), когда длина свободного пробега электрона в образце меньше протяженности пространственного заряда областей кластеров дефектов. В электрическом поле электроны будут двигаться диффузно, огибая недоступные области пространственного заряда. Тогда холловская подвижность при $T > 160$ К равна [12]

$$\mu_H = A_1 \mu_d \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right) \cdot \frac{(1-\delta) n}{1+Bf <n>}, \quad (6)$$

где μ_d – дрейфовая подвижность носителей до облучения; A_1 – холл-фактор в образце до облучения с учетом диффузного движения электронов; f – доля объема диэлектрических включений (кластеров); B – коэффициент поляризации кластеров дефектов в электрическом поле [12]; $E_v = E_n - \zeta$ – средняя величина дрейфовых барьеров, определяемая как разность энергии между «уровнем протекания» (E_n) и уровнем химического потенциала (ζ).

В приближении эффективной среды изменение подвижности носителей определяется чисто геометрически. Но в электрическом поле электрон в образце имеет возможность двигаться или в областях пространственного заряда кластеров дефектов, или в областях «озер», и эти события являются независимыми. Движение электронов в образце есть осуществление обоих событий, поэтому вероятности событий умножаются. Изменение подвижности

электронов можно определить согласно теории умножения вероятностей $\delta=(fF)/3$, где F – доля объема «озер» с концентрацией (n) носителей, где отсутствует объемный заряд. Считается, что коэффициент Холла (R) определяется средней по образцу концентрацией $\langle n \rangle$ носителей.

ОБСУЖДЕНИЕ

При облучении полупроводников быстрыми нейтронами атомам решетки в n -Si передается ми-

нимальная энергия ($> 4,7$ кэВ), достаточная для образования областей с каскадами смещенных атомов. После атермической перестройки вакансии объединяются в дивакансии, тривакансии и тетравакансии, а после релаксации решетки межузельные атомы кремния оказываются в потенциальных ямах глубиной 0,41 эВ. В проводящей матрице образца n -Si образуются кластеры дефектов, окруженные областью пространственных зарядов с высокой концентрацией дивакансий.

Таблица 1

Энергетическое положение уровней дивакансии и их зарядовое состояние в кремнии и германии в зависимости от атомной конфигурации, где E_H – корреляционная энергия (Hubbard); ΔE – изменение энергии уровня V_2 в Ge относительно Si

Атомная конфигурация		Зарядовое состояние, эВ					E_H , эВ	ΔE , эВ
Si	Ge	3-/2-	2-/-	-/0	0/0	0/+	–	–
	Q_1	$E_c-0,09$	$E_c-0,261$	$E_c-0,426$	$E_v+0,53$	$E_v+0,365$	0,165	–
	Q_2	$E_c+0,08$	$E_c-0,17$	$E_c-0,42$	$E_v+0,45$	$E_v+0,20$	0,25	–
	Q_1	$E_c-0,25$	$E_v+0,25$	$E_v+0,085$	$E_v-0,08$	–	0,165	0,16
	Q_2	$E_c-0,05$	$E_c-0,30$	$E_v+0,11$	$E_v-0,14$	–	0,25	0,13

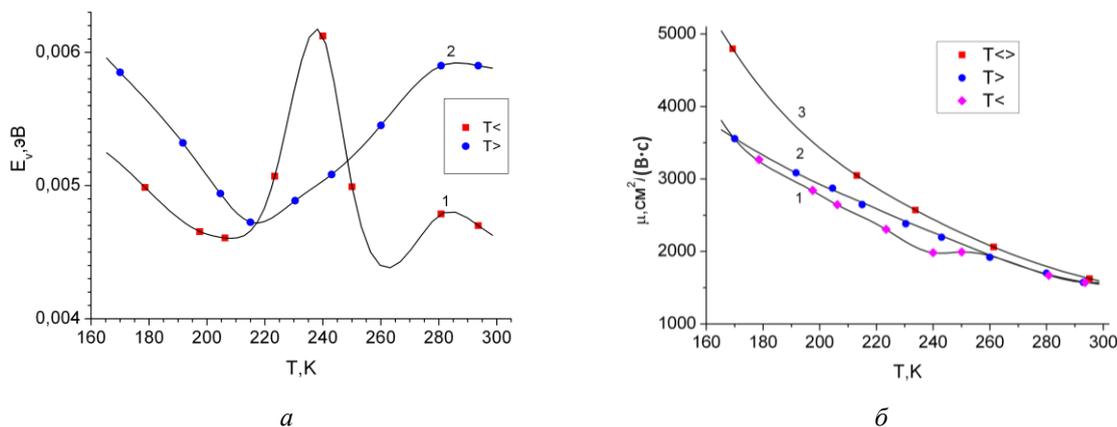


Рис. 1. Температурные зависимости дрейфовых барьеров (а) и подвижности электронов (б), измеренные на образце n -Si (З.П.) с концентрацией носителей до облучения $n_0=1,56 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, облученном быстрыми нейтронами (n^0) флюенсом $3,0 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$.

Кривая 1 снята с понижением, а кривая 2 – с обратным повышением температуры

Моливер С.С. [1] показал, что в кремнии дивакансия является дефектом с двухъямным потенциалом и может находиться в конфигурации как с большей, так и с меньшей дисторсией. Перестройка дивакансий из одной конфигурации в другую приводит к изменению корреляционной энергии уровней в запрещенной зоне кремния (табл. 1). Расчеты в рамках уточненной модели Госсика [10] показали, что при понижении температуры образца n -Si уровень Ферми в проводящей матрице смещается ко дну зоны проводимости, длина дебаевского экранирования уменьшается, а высота потенциального барьера кластера растет. Акцепторные дефекты в областях пространственного заряда кластеров частично перезаряжаются, что уменьшает экранирующий эффект положительно заряженных доноров и приводит к дополнительному перекрытию кластеров дефектов. К геометрическому перекрытию кластеров дефектов прибавляется дополнительное перекрытие их областей пространственного заряда.

Обычно при этом наблюдается уменьшение подвижности электронов в проводящей матрице из-за роста высоты дрейфовых барьеров [12]. В собственном кремнии уровень Ферми находится на нейтральном уровне дивакансии и с увеличением уровня легирования смещается ко дну зоны проводимости (4). Если в кластерах уровень Ферми закреплён между уровнями дивакансии в нейтральном и заряженном состояниях, то в проводящей матрице уровень Ферми при понижении температуры смещается ко дну зоны проводимости. В проводящей матрице образца n -Si при комнатной температуре длина свободного пробега электрона не больше 350 Å, а длина дебаевского экранирования около 5400 Å. При движении в проводящей матрице под действием электрического поля электроны диффузно огибают области пространственного заряда, преодолевая дрейфовые барьеры.

При понижении температуры образца дивакансиям энергетически выгодно в кремнии занимать

более глубокую потенциальную яму. Электроны из зоны проводимости при понижении температуры захватываются не только на отрицательные уровни дивакансий, но и на акцепторный уровень межузельного атома кремния. Поэтому энергия активации движения I_{Si} уменьшается и, преодолев барьер, атом перемещается из кластера. Деформация решетки вокруг дивакансий в кластере понижается, и они из конфигурации с большей дисторсией переходят в конфигурацию с меньшей дисторсией. Захват электронов на уровень дивакансии V_2^{-0} в Q_1 - или Q_2 -конфигурации определяется положением уровня Ферми. Если дивакансии в кластере в Q_1 -конфигурации, то положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости равно $E_c-0,5075$ эВ и $E_c-0,545$ эВ в Q_2 -конфигурации в высокоомном кремнии и с увеличением уровня легирования смещается к зоне проводимости n -Si согласно (4) на величину $\sim 0,05$ эВ. Поэтому, когда при понижении температуры дивакансии в кластере меняют конфигурацию, то электроны из зоны проводимости не могут захватиться на $E_c-0,42$ эВ уровень дивакансии в конфигурации Q_2 . Тогда незахваченные электроны в области температур 240...200 К в проводящей матрице понижают дрейфовые барьеры, и подвижность электронов растет (см. рис. 1,а,б, кривая 1). Метод расчета температурных зависимостей дрейфовых барьеров после облучения и вы-

держки при комнатной температуре в n -Si проведен согласно (6) и подробно описан в [12]. Изменение положения уровня Ферми в кластерах дефектов, обусловленное конфигурационной перестройкой дивакансий, повысило дрейфовые барьеры движения электронов в проводящей матрице образца кремния (см. рис. 1,а, кривая 2).

Когда температура при измерении образца растет и вероятность захвата электрона на отрицательный уровень дивакансии низкая, подвижность электронов растет и кривая лежит выше (см. рис. 1,б, кривая 2).

Результаты расчета температурных зависимостей кинетических коэффициентов в образцах n -Si, облученных флюенсами быстрых нейтронов реактора, приведены в табл. 2. Расчет температурной зависимости концентрации носителей в проводящей матрице образца проводился в рамках уточненной модели Госсика согласно уравнению (5).

Как показали вычисления температурной зависимости концентрации носителей, положение уровня Ферми в среднестатистическом кластере дефектов среднего радиуса ($R_1 = 50$ Å) понизилось на $\mu = 0,02$ эВ. Тогда можно показать, что около $\sim 30\%$ дивакансий в конфигурации с большей дисторсией имели конфигурацию при понижении температуры образца n -Si.

Таблица 2

Параметры расчета концентрации (N_a) и энергетического положения уровней (E_a) в проводящей матрице n -Si (Fz) после облучения различными дозами быстрых нейтронов реактора (Φ);

N_d – концентрация экранирующих центров вне нарушенной области кластеров дефектов;

t – время изотермического отжига образцов при комнатной температуре

$\Phi \cdot 10^{-13}, n^0 \cdot cm^{-2}$	$n_0 \cdot 10^{-14}, cm^{-3}$	$E_c - E_a, \text{эВ}$	$N_d \cdot 10^{-13}, cm^{-3}$	$N_a \cdot 10^{-13}, cm^{-3}$	$t, \text{ч}$
2,7	1,55	0,450	15,5	8,05	5
–	–	0,39	7,45	1,0	–
–	–	0,205	6,45	1,0	–
–	–	0,19	5,45	1,0	–
3,0	1,56	0,450	15,6	9,7	5
–	–	0,39	5,9	0,7	–
–	–	0,205	5,2	1,5	–
–	–	0,19	3,7	0,7	–

В работе [8] предложена схема уровней собственных радиационных дефектов, которая базируется не только на литературных данных. Фоновые примеси и межузельные атомы создают дополнительную деформацию решетки кремния вблизи дивакансий, и они находятся в конфигурации с большей дисторсией.

На основе этой работы можно предположить, что уровень $E_c-0,455$ эВ принадлежит дивакансии, модифицированной межузельным атомом кремния в конфигурации с большей дисторсией (см. табл. 2). А уровни дефектов $E_c-0,39$ эВ и $E_c-0,19$ эВ принадлежат дивакансии, модифицированной углеродом, и они находятся соответственно в однократно и двукратно отрицательных заряженных состояниях. Возможно уровень $E_c-0,205$ эВ – это А-центр, моди-

фицированный межузельным атомом кремния, а уровень $E_c-0,45$ эВ принадлежит Е-центру.

Поведение температурных зависимостей подвижности и концентрации электронов в высокоомных образцах кремния показано на рис. 2. С увеличением дозы облучения большее количество дивакансий уже при более высокой температуре получает возможность конфигурационной перестройки. Происходит относительное понижение высоты дрейфовых барьеров и рост подвижности электронов (см. рис. 2,а). Результаты расчета температурных зависимостей кинетических коэффициентов в образцах n -Si (Fz), облученных флюенсами быстрых нейтронов реактора, приведены в табл. 3. Расчет температурной зависимости концентрации носителей в проводящей матрице образца проводился также в рамках уточненной модели Госсика согласно уравнению (3)–(5).

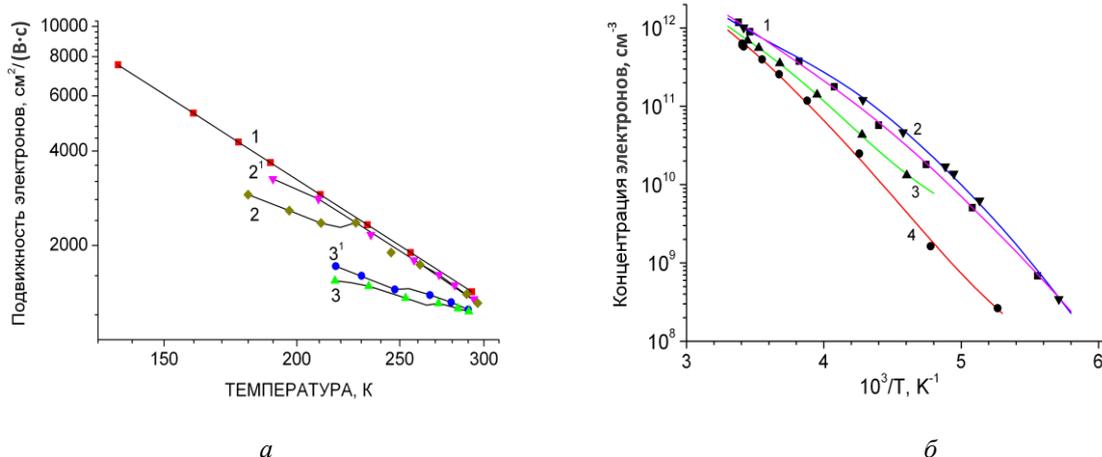


Рис. 2. Температурные зависимости подвижности и концентрации электронов в *n*-Si (Fz), измеренные на образцах с концентрацией носителей до облучения $n_0 = 6,5 \cdot 10^{12}$ и $6,1 \cdot 10^{12}$ см^{-3} , облученных n^0 -флюенсом $\Phi = 2,5 \cdot 10^{12}$ и $2,8 \cdot 10^{12}$ $\text{н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$. Кривые измерены: 1 – до и после облучения с выдержкой образца при температуре 292 K до измерений и в течение времени: 2 – 5 ч; 2¹ – 24 ч; 3 – 5 ч; 3¹ – 72 ч

Таблица 3

Параметры расчёта концентрации (N_a) и энергетического положения уровней (E_a) в проводящей матрице *n*-Si (Fz) после облучения различными дозами быстрых нейтронов реактора (Φ); t – время изотермического отжига образцов при комнатной температуре

$\Phi \cdot 10^{-12}$, $\text{н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$	$n_0 \cdot 10^{-12}$, см^{-3}	$E_c - E_a$, эВ	$N_d \cdot 10^{-12}$, см^{-3}	$N_a \cdot 10^{-12}$, см^{-3}	t , ч
–	–	0,51	6,5	2,1	–
2,5	6,5	0,455	4,4	4,2	5
–	–	0,37	0,2	0,22	–
–	–	0,51	6,5	3,5	–
2,5	6,5	0,455	3,0	2,4	24
–	–	0,37	0,6	0,67	–
–	–	0,51	6,1	3,8	–
2,8	6,1	0,455	2,3	1,9	5
–	–	0,425	0,4	0,355	–
2,8	6,1	0,51	6,1	3,5	72
–	–	0,455	2,6	2,645	–

Высокая концентрация кислорода в исследованных образцах способствует увеличению концентрации межузельных дефектов как в проводящем объеме, так и в кластерах дефектов. Согласно [7], в образцах Cz-Si и Si<Ge> кислород препятствует выходу на поверхность межузельных атомов Si, а также, возможно, является центром, на котором образуется димежузельный дефект, когда в одном междоузлии они удерживаются только потенциальным рельефом кристалла. Межузельные атомы кремния (I_{Si}) увеличивают деформацию решетки около дивакансий в кластере. При выдержке образцов при комнатной температуре I_{Si} уже не уходят на стоки, в том числе и на поверхность образца. Такое старение *n*-Si (Cz) при комнатной температуре приводит не только к модификации дивакансий межузельными атомами Si, но и к аннигиляции с ними дефектов вакансион-

ного типа. Из рис. 3 видно, что с увеличением времени выдержки при температуре 292 K конфигурационная перестройка дивакансий происходит при более низкой температуре. Но при выдержке 20 ч наблюдаем (см. рис. 3, кривая 3) сильное уменьшение подвижности электронов. Предположим, что в кластерах произошли модификации дивакансий межузельными атомами Si. Тогда возросла вероятность захвата электронов на уровень $E_c - 0,455$ эВ дефекта V_2I_{Si} в кластерах, усилилось перекрытие пространственных зарядок кластеров, и дрейфовые барьеры возросли. Характер температурной зависимости концентрации электронов $n(T)$ в проводящей матрице (см. рис. 3) свидетельствует, что отжиг *n*-Si (Cz) при комнатной температуре не изменяет суммарную концентрацию дефектов вакансионного типа.

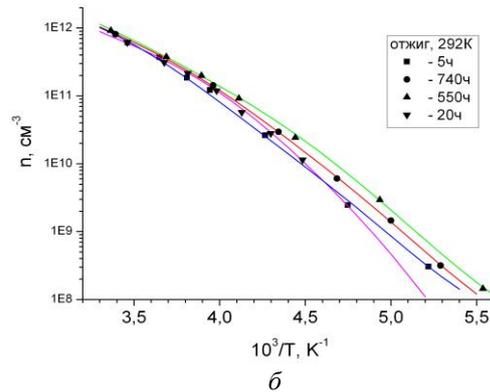
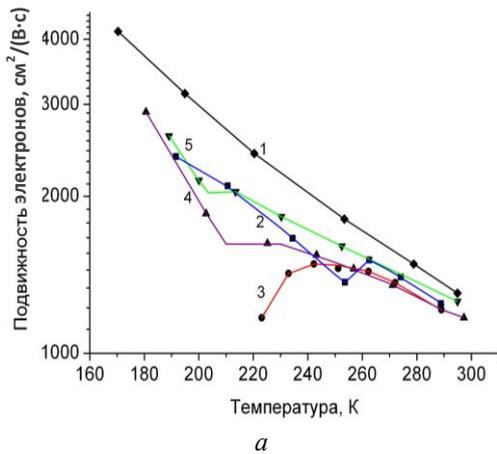


Рис. 3. Температурные зависимости подвижности и концентрации электронов в n-Si (Cz), измеренные на образце с концентрацией носителей до облучения $n_0=5,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, облученном n^0 -флюенсом $5,4 \cdot 10^{12} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$. Кривые измерены: 1 – до облучения и после облучения с выдержкой образца при температуре 292 К до измерений и в течение времени: 2 – 5 ч; 3 – 20 ч; 4 – 550 ч; 5 – 740 ч

Таблица 4

Параметры расчета концентрации (N_a) и энергетического положения (E_a) уровней в проводящей матрице n-Si (Cz) после облучения и изотермического отжига образцов при комнатной температуре в течение времени t

$\Phi \cdot 10^{-12}, \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$	$n_0 \cdot 10^{-12}, \text{ см}^{-3}$	$E_c - E_a, \text{ эВ}$	$N_d \cdot 10^{-12}, \text{ см}^{-3}$	$N_a \cdot 10^{-12}, \text{ см}^{-3}$	$t, \text{ ч}$
5,4	5,6	0,51	5,6	2,3	5
		0,425	3,3	3,27	–
		0,51	5,6	3,2	20
		0,425	2,4	1,2	–
		0,39	1,2	1,3	–
		0,51	5,6	0,6	550
		0,455	5,0	2,75	–
		0,425	2,25	1,0	–
		0,39	1,25	1,227	–
		0,51	5,6	2,1	740
		0,455	3,5	0,1	–
		0,425	3,4	2,8	–
		0,39	0,6	0,58	–

Результаты расчетов температурных зависимостей кинетических коэффициентов в образце, представленные в табл. 4, показывают суммарную концентрацию ($\sim 5,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$) дефектов независимо от времени отжига. При этом при уменьшении концентрации уровня $E_c - 0,425 \text{ эВ}$ $V_2^{2-/}$ увеличивается концентрация уровня $E_c - 0,51 \text{ эВ}$ или $E_c - 0,455 \text{ эВ}$. Отжиг более мелкого уровня $E_c - 0,39 \text{ эВ}$ ($V_2C_1^{2-/}$) до концентрации $\sim 0,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ и дивакансии в кластерах из конфигурации с большей дисторсией переходят в конфигурацию с меньшей дисторсией при температуре на $\sim 50 \text{ К}$ ниже. Предполагается идентичность поведения вакансионного типа дефектов как в кластерах дефектов, так и в проводящей матрице.

Дивакансия в кремнии находится в двухъямном потенциале в конфигурации Q_1 с большей дисторсией и в Q_2 с меньшей дисторсией [1]. Экспериментально показано [13], что в p-Si дивакансия при понижении температуры образца может менять конфигурацию ($Q_1 \rightarrow Q_2$).

В кремнии и германии рассмотрены эксперименты, которые можно объяснить как конфигурационные переходы дивакансии с большей дисторсией в меньшую и наоборот, а также приведены значения энергетических уровней дивакансии в кремнии и германии в разных конфигурациях [13–15]. Таким образом, дивакансии в кремнии можно отнести к бистабильным амфотерным центрам. «Электронные» характеристики дефекта могут существенным образом изменяться при изменении конфигурации или заряда на нем. Захват электрона на акцепторный уровень вакансионного дефекта ведет к увеличению его энергии на величину $\Delta E = 0,33/\xi$, где ξ – число вакансий в дефекте [8]. В случае амфотерных бистабильных дефектов температурная зависимость концентрации свободных носителей равна [16]

$$n(T) = N_C \cdot \exp\left(-\frac{E_1 + E_2 - (W_{21}^0 - W_{12}^0)}{2kT}\right), \quad (7)$$

где N_C – плотность состояний в зоне проводимости; $E_1 < E_2$ – электронные уровни бистабильного дефекта

та; $W_{21}-W_{12}$ – энергия конфигурационной перестройки из Q_1 в Q_2 .

Величина $\frac{1}{2}$ отражает одновременность процесса рекомбинации через оба центра. В нашем случае дважды отрицательная дивакансия (V_2^{2-}) может находиться в различных конфигурациях: с $E_c-0,26$ эВ энергией в первой и $E_c-0,17$ эВ – во второй. Разность обусловлена тем, что захват электрона на акцепторный уровень $E_c-0,17$ эВ затруднен, поскольку переход в это состояние связан с необходимостью изменения конфигурации, а энергетические затраты в этом случае составили бы $W_{21}-W_{12} = 0,08$ эВ [17].

В нашем случае энергия перехода дивакансии именно с $E_c-0,26$ эВ уровня первой конфигурации на уровень $E_c-0,17$ эВ второй конфигурации равнялась 0,09 эВ.

При понижении температуры дивакансии энергетически выгодно занимать более глубокую потенциальную яму, но при меньшей дисторсии решетки, чем в Q_1 -конфигурации. Поэтому при захвате второго электрона на уровень дивакансии $E_c-0,42$ эВ его энергия увеличится на $E_H = 0,16$ эВ (энергия Hubbard), так как дисторсия решетки еще немаленькая. В запрещенной решетке кремния появится два-

жды отрицательный уровень $E_c-0,26$ эВ дивакансии. Если при этом дефект получает от фонона энергию ($E=W_{21}-W_{12}$) $\sim 0,09$ эВ, то согласно (7) экспериментально будет наблюдаться уровень дивакансии $E_c-0,17$ эВ с медленной скоростью захвата электрона. Возможно, при этом дисторсия решетки около дивакансии понижается. Кроме того, при определенном положении уровня Ферми с равной вероятностью электрон может быть захвачен как на уровень $E_c-0,26$ эВ, так и на уровень $E_c-0,17$ эВ в Q_1 - и Q_2 -конфигурациях соответственно. Тогда появляется обобщенный уровень дивакансии $E_c-0,23$ эВ [18]. Согласно (7) дивакансия передает фонону энергию $E = 0,047$ эВ, если учесть энтальпию $\sim 0,017$ эВ сечения захвата электрона на $E_c-0,23$ эВ уровень [17]. Таким образом, появление обобщенного уровня дивакансии $E_c-0,23$ эВ энергетически выгодно. Предположим, что электрон захватывается на нейтральный уровень дивакансии $E_v+0,45$ эВ в конфигурации со средней дисторсией, тогда энергия уровня увеличивается на $E_H = 0,16$ эВ, и появляется $E_c-0,51$ эВ – отрицательно заряженный уровень обобщенных конфигураций дивакансии. Другие уровни обобщенных конфигураций дивакансии приведены в табл. 5.

Таблица 5

Уровни обобщенных конфигураций дивакансии в кремнии, эВ

Атомная конфигурация	Зарядовое состояние уровней дивакансии в кремнии			
	2-/-	-/0	0/0	0/+
$Q_1 \leftrightarrow Q_2$	$E_c-0,26$	$E_c-0,51$	$E_v+0,36$	$E_v+0,11$

Самое интересное поведение уровня $E_c-0,51$ эВ: концентрация то растет, то уменьшается, то снова растет в процессе отжига при комнатной температуре. Электроны из зоны проводимости при понижении температуры захватываются на нейтральный уровень дивакансии, и энергия уровня растет на величину энергии Hubbard. Экспериментально показано [14], что в кремнии энергия Hubbard (E_H) для дивакансии в Q_1 -конфигурации равняется 0,165 эВ, а в Q_2 -конфигурации – 0,25 эВ и не зависит от числа захваченных электронов. Дивакансии могут находиться в конфигурации с большей дисторсией в сильном деформационном поле, создаваемом межузельными атомами кремния (I_{Si}) не только в кластерах дефектов, но и в проводящей матрице. При теоретическом описании экспериментальной температурной зависимости концентрации электронов выявляется уровень $E_c-0,51$ эВ, который можно определить только в проводящей матрице образцов кремния [19]. Возможно, модифицирование дивакансий углеродом и межузельными атомами кремния в процессе отжига при комнатной температуре переводит дивакансии в конфигурацию со средней дисторсией.

ВЫВОДЫ

Предложена модель поведения межузельных атомов кремния в кластерах дефектов, которая объясняет температурную зависимость подвижности электронов при измерении эффекта Холла с понижением и обратным повышением температуры об-

разцов кремния, выращенных различными методами. Модель основывается на уменьшении энергии миграции I_{Si} при захвате электрона на акцепторный $E_c-0,37$ эВ уровень межузельного атома кремния. Показано, что около $\sim 30\%$ дивакансий в конфигурации с большей дисторсией изменили свою конфигурацию при понижении температуры образца n -Si (3.П.). Тем не менее, при понижении температуры образца дивакансии энергетически выгодно в кремнии занимать более глубокую потенциальную яму. А при захвате электрона энергия нейтрального уровня повысится только на 0,16 эВ. Предложено объяснение, почему уровень $E_c-0,51$ эВ следует приписать дивакансии и энергетически выгодно образование $E_c-0,23$ эВ обобщенного уровня дивакансии в кремнии. Представлены и другие уровни обобщенных конфигураций дивакансий в кремнии в различных зарядовых состояниях.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. С.С. Моливер. Метод открытой оболочки для электронной структуры дивакансии кремния // *ФТТ*. 1999, т. 41, №3, с. 404-410.
2. M. Suezawa, Y. Takada, T. Tamano, R. Taniguchi, F. Hori, and R. Oshima. Migration energies of point defects during electron irradiation of hydrogenated Si crystals // *Phys. Rev. B*. 2002, v. 66, p. 155201-6.
3. G.D. Watkins, J.R. Troxell, A.P. Chatterjee. Vacancies and interstitials in silicon // *Proc. Intern. Conf. "Defects and Radiation Effects in Semiconductors"*.

Ser. N 46 (Nice, 1978). Inst. of Phys. Bristol and London, 1979, p. 16-30.

4. М.Д. Варенцов, Г.П. Гайдар, А.П. Долголенко, П.Г. Литовченко. Радиационная стойкость кремния, легированного германием, с высокой концентрацией свободного кислорода // *Ядерная физика та енергетика*. 2006, №1 (17), с. 60-66.

5. В.Л. Винецкий, Г.А. Холодарь. *Радиационная физика полупроводников*: Монография. К.: «Наукова думка», 1979, с. 200-336.

6. Н.А. Ухин. Модель разупорядоченных областей в кремнии, созданных быстрыми нейтронами // *ФТП*. 1972, т. 6, №5, с. 931-934.

7. А.П. Долголенко, П.Г. Литовченко, М.Д. Варенцов, Г.П. Гайдар, А.П. Литовченко. Особенности образования радиационных дефектов в кремнии с низкой и высокой концентрацией свободного кислорода // *Збірник наукових праць Інституту ядерних досліджень*. 2005, №2(15), с. 106-114.

8. A.P. Dolgolenko, P.G. Litovchenko, M.D. Varentsov, G.P. Gaidar, A.P. Litovchenko. Particularities of the formation of radiation defects in silicon with low and high concentration of oxygen // *Phys. Stat. Sol. (b)*. 2006, v. 243, N 8, p. 1842.

9. B.R. Gossick. Disordered Regions in Semiconductors Bombarded by Fast Neutrons // *J. Appl. Phys.* 1959, v. 30, N 8, p. 1214-1218.

10. A.P. Dolgolenko. Variation of Carrier Removal Rate with Irradiation Dose in Fast-Pile Neutron Irradiated n-Si // *Phys. Stat. Sol. (a)*. 2000, v. 179, p. 179-188.

11. В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников*. М.: «Наука», 1977, с. 672.

12. А.П. Долголенко. Диффузное и дрейфовое движение электронов в n-типе кремния, облученно-

го быстрыми нейтронами реактора // *Ядерная физика и атомная энергетика* (12). 2011, №2, с. 167-172.

13. А.П. Долголенко. Электронные уровни конфигураций дивакансий в кремнии // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (81). 2012, №5, с. 13-20.

14. А.П. Долголенко. Электронные уровни конфигураций дивакансий в германии // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (87). 2013, №5, с. 37-42.

15. А.П. Долголенко. Конфигурационные переходы дивакансий в кремнии и германии // *Ядерная физика та енергетика*. 2013, т. 14, №2, с. 163-171.

16. А.Г. Никитина, В.В. Зуев. Бистабильные амфотерные центры в полупроводнике // *ФТП*. 2008, т. 42, №2, с. 141-146.

17. S.D. Brotherton and P. Bradley. Defect production and lifetime control in electron and γ -irradiation silicon // *J. Appl. Phys.* 1982, v. 53, N 8, p. 5720-5732.

18. А.П. Долголенко. Конфигурационная перестройка дивакансии: электронные обобщенные уровни в запрещенной зоне кремния // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2015, № 5(99), с. 22-27.

19. А.П. Долголенко. Подвижность носителей в случае диффузного движения при конфигурационной перестройке дивакансий в кремнии // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2014, №4(92), с. 38-43.

Статья поступила в редакцию 14.12.2016 г.

РІВНІ ОБ'ЄДНЕННЯ КОНФІГУРАЦІЙ ДИВАКАНСІЙ В КРЕМНІІ ПРІ УЧАСТІ МІЖВУЗЛОВИХ АТОМІВ

О.П. Долголенко

Описано поведінку рухливості електронів при їх дифузному русі у високоомному кремнії, вирощеному методом безтигельного зонного плавлення (Fz) і методом Чохральського (Cz), після опромінення швидкими нейтронами реактора і наступного відпалу при кімнатній температурі. У рамках дифузної моделі розрахована в зразках кремнію в присутності кластерів дефектів температурна залежність дрейфових бар'єрів рухливості електронів. Визначено концентрації та енергетичні рівні радіаційних дефектів у провідній матриці n-Si. Обґрунтовано роль міжвузлових атомів кремнію в гістерезисі температурної залежності рухливості електронів як в їх участі в конфігураційній перебудові дивакансій в кластерах дефектів, так і в утворенні рівнів об'єднаних конфігурацій.

THE LEVELS OF GENERALIZATION CONFIGURATION DIVACANCIES IN SILICON AT PARTICIPATION OF INTERSTITIAL ATOMS

A.P. Dolgolenko

The behavior of the mobility of electrons as they diffuse movement in the high-resistivity silicon, grown by floating zone melting (Fz) and Czochralski (Cz), after irradiation with fast neutrons reactor and subsequent annealing at room temperature was described. As part of the diffuse model in silicon is designed temperature dependence of the drift barriers of the electrons motion in the presence of defect clusters in samples. The concentrations and energy levels of radiation defects in a conductive matrix of n-Si defined. It substantiates the role of interstitial silicon atoms in the hysteresis of the temperature dependence of the electron mobility and their participation in the restructuring of the configuration divacancy defects and the formation of levels generalization configuration.