

КОНФИГУРАЦИОННАЯ ПЕРЕСТРОЙКА ДИВАКАНСИИ ПОД ВЛИЯНИЕМ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ СТИМУЛЯЦИЙ

А.П. Долголенко

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев, Украина

E-mail: odolgoenko@kinr.kiev.ua

Описана температурная зависимость концентрации электронов в облученных γ -квантами ^{60}Co кристаллах n -типа кремния, связанная с перезарядкой дважды и отрицательно заряженной дивакансии в процессе ее конфигурационной перестройки из одной конфигурации с большей дисторсией в конфигурацию с меньшей дисторсией. Показано, что экспериментальное наблюдение обобщенного уровня $E_c-0,23$ эВ дивакансии возможно только в процессе ее конфигурационной перестройки. Экспериментально наблюдалось, что концентрация V_2^{2-} с уровнем $E_c-0,261$ эВ определяется не только видом и дозой ядерного излучения, но и зависит от уровня легирования кристаллов кремния. Определена скорость конфигурационной перестройки дивакансии из одной конфигурации с большей дисторсией в конфигурацию с меньшей дисторсией как функция энергии и температуры ее перезарядки. Обнаружено, что ультразвуковая обработка облученных γ -квантами образцов n -Si усиливает миграцию межузельных атомов (C_i), разрушая радиационные дефекты (P_s-C_i), и уменьшает вероятность конфигурационной перестройки дивакансии из одной конфигурации с большей дисторсией в конфигурацию с меньшей дисторсией.

ВВЕДЕНИЕ

Благодаря своим фундаментальным характеристикам [1] дивакансия наиболее интенсивно изучалась как экспериментально облучением кремния ядерными частицами, так и теоретически. В работе [2] определено, что при повышенных температурах для V_2^+ при 110 К и для V_2^- при 70 К скорость электронных прыжков между членами триплетных эквивалентных JT-направлений дисторсии такая высокая, что дисторсия каждой конфигурации является динамично «усредненной», а эффективная симметрия увеличивается до D_{3d} . Авторы [3], обосновав теоретически, высказали принципиальную возможность существования двух: $V_2^{2-} (D_{3d})$ и $V_2^{2-} (C_{2h})$ дефектных состояний в n -Si, облученном энергетическими частицами. При этом фононом ассистированные переходы могут наблюдаться между этими двумя состояниями. Дивакансии окончательно было приписано положение в запрещенной зоне кремния с энергией $E_c-0,23$ эВ [4], хотя экспериментально определялись значения от $E_c-0,22$ до $E_c-0,261$ эВ [5, 6]. Авторы наблюдали отклонение отношения 1:1 концентраций между V_2^{2-0} и V_2^{2-} при γ -облучении [5], в случае облучения ионами различной массы [7]. При облучении адронами различной энергии [8] оно составляло 1:(2-4) из-за уменьшения заселенности уровня дивакансии V_2^{2-} . Уровень дивакансии (V_2^{2-}) $E_c-0,261$ эВ наблюдался не только при α -облучении [6], но и при γ -облучении в высоколегированных образцах n -Si [9]. С.С. Моливер [10] ввел представление о двухъямном потенциале дивакансии в нейтральном и заряженном состояниях и теоретически показал, что в кремнии дивакансия может находиться в конфигурациях с большей и с меньшей дисторсиями. Разность энергий между абсолютным и метастабильным минимумами адиабатической энергии нейтральной дивакансии была определена значением 0,07 эВ [10]. Это

позволило в работе [11] обосновать энергетические уровни дивакансии во второй конфигурации с меньшей Jahn-Teller дисторсией. Рассмотрены эксперименты с кремнием и германием, 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 [12].

Цель работы описать температурную зависимость концентрации носителей, связанную с перезарядкой в n -Si дважды и однократно отрицательно заряженной дивакансии в процессе конфигурационного перехода из одной конфигурации в другую до и после воздействия ультразвука.

СТАТИСТИКА ЗАПОЛНЕНИЯ АКЦЕПТОРНЫХ СОСТОЯНИЙ ДИВАКАНСИИ В n -Si

Рассмотрим n -Si-полупроводник, легированный атомами фосфора, с концентрацией N_d в области от комнатной температуры до температуры жидкого азота. Пусть имеются точечные дефекты акцепторного типа с концентрацией $N_a < N_d$. Будем считать n -Si невырожденным и некомпенсированным ($N_d < 10^{14} \text{ см}^{-3}$). Тогда при повышении температуры образца n -Si от 77 К будем наблюдать некоторую концентрацию электронов $n_i(T)$ в зоне проводимости в результате теплового возбуждения электронов с уровнем E_a^i в образце.

Дивакансия является многозарядным радиационным дефектом, который может находиться в конфигурации (Q_1) с большей дисторсией в кремнии с корреляционной энергией 0,165 эВ и в конфигурации (Q_2) с меньшей дисторсией с корреляционной энергией 0,25 эВ [11]. Представим, что дивакансии являются основными радиационными дефектами в n -Si с акцепторными уровнями $E_c-0,426$ и $E_c-0,261$ эВ в запрещенной зоне

в первой и $E_c-0,42$ и $E_c-0,17$ эВ во второй конфигурациях. В зависимости от температуры образца они могут находиться в отрицательно заряженном или нейтральном состояниях. Условие электронейтральности согласно [13] можно представить как

$$N_d = n + N_a \sum_i^m i f^i, \quad (1)$$

где f^i – вероятность заполнения электронами i -уровня; n – концентрация электронов в зоне проводимости; m – максимальное число акцепторных уровней.

Если $N_d > N_a$, то $n > p$, и мы имеем полупроводник n -типа. Если при этом температура не слишком высокая, то концентрацией неосновных носителей можно пренебречь. В общем случае примесной проводимости получим квадратичное уравнение

$$\frac{n(iN_a - N_d + n)}{N_d - (i-1)N_a - n} = g N_c(T) \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right). \quad (2)$$

В случае $i=1$ при решении квадратичного уравнения (2) получим температурную зависимость концентрации электронов. В случае $m=2$ решение (1) показывает, что $N_{d1} = N_d - N_a$, а $N_{a1} = N_a$ – концентрация второго акцепторного уровня дивакансии с $E_{a1} > E_a$.

Из решения квадратичного уравнения, которое вытекает из условия электронейтральности [13], имеем температурную зависимость концентрации электронов в образце:

$$n_1(T, E_a) = \frac{1}{2}(N_d - N_a - n_{11}(E_a)) \left(\sqrt{1 + \frac{4N_d n_{11}(E_a)}{(N_d - N_a - n_{11}(E_a))^2}} + 1 \right),$$

$$n_{11}(E_a) = g N_c(T) \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (3)$$

где $g=2$ – фактор вырождения акцепторного уровня в n -Si; N_a – концентрация акцепторных дефектов; $n_{11}(E_a)$ – концентрация электронов в зоне проводимости n -Si, когда уровень Ферми совпадает

с уровнем E_a в проводящей матрице; N_d – концентрация доноров в образце.

В зависимости от энергетического положения уровней дивакансии в запрещенной зоне кремния их перезарядка в зависимости от температуры образца лежит в различных областях температурной шкалы. Тогда предположим, что в случае отсутствия статистического взаимодействия между уровнями радиационных дефектов, концентрации носителей в проводящей матрице n -Si можно определить, если вычислить суммарную концентрацию электронов $\sum_i n_i(T, E_i)$, которые будут поставляться в зону проводимости при ионизации акцепторных уровней.

$$n(T) = \sum_i^m n_i(T, E_i) - \sum_i^{m-1} N_d^{i+1}, \quad (4)$$

$$N_d^2 = n_0 - N_a^1.$$

При $m=2$ – два акцепторных уровня дефектов присутствуют в проводящей матрице; n_0 – начальная концентрация электронов в n -Si; N_a^1 – концентрация первого глубокого акцепторного уровня. При увеличении числа акцепторных уровней дефектов ($i > 2$) надо вычитать в уравнении (4) каждый раз концентрацию свободных доноров (N_d) при добавлении нового акцепторного дефекта (3).

РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

С.С. Моливер [10] теоретически показал, что в кремнии дивакансии могут находиться в конфигурации с большей и с меньшей дисторсией. Экспериментально доказано [11], что дивакансии из атомной конфигурации в состоянии (Q_1) с большей дисторсией могут перестраиваться в конфигурацию с меньшей дисторсией (Q_2).

Предположим, что в результате облучения в образцы кремния n -типа вводятся одни дивакансии. Уровни различных зарядовых состояний дивакансии в кремнии в зависимости от конфигураций Q_1 и Q_2 представлены в табл. 1.

Таблица 1

Энергетическое положение уровней дивакансии в различных зарядовых состояниях в кремнии в зависимости от атомной конфигурации

Атомная конфигурация	$E_c - E_a$, эВ		$E_v + E_d$, эВ		ΔE , эВ
	=/-	-/0	0/+	0/0	
D_{3d}	0,261	0,426	0,365	0,53	0,165
C_{2h}	0,17	0,42	0,20	0,45	0,25

Пусть N_1 – концентрация дивакансий в конфигурации Q_1 с большей дисторсией и энергетическим положением в запрещенной зоне кремния относительно зоны проводимости E_1 и N_2 – концентрация дивакансий в конфигурации Q_2 с меньшей дисторсией и энергетическим положением в запрещенной зоне кремния относительно зоны проводимости E_2 . Считаем, что $E_1 < E_2$. Даже при комнатной температуре существует принципиальная возможность существования этих двух дефектных состояний дивакансии [3]. Рассмотрим дивакансии (V_2^{-0}) в n -Si, облученном γ -квантами ^{60}Co . Из табл. 1

видно, что энергетические положения дивакансий в конфигурациях Q_1 и Q_2 в запрещенной зоне n -Si близки, и экспериментально должен наблюдаться обобщенный уровень с концентрацией $N_1 + N_2$ в отсутствие конфигурационных переходов.

При температурах, при которых обычно проводятся измерения, время переориентации дивакансии [1] в n -Si значительно меньше времени перезарядки дефекта. Поэтому при понижении температуры дивакансия из конфигурации Q_1 , еще не захватив электрон на уровень E_1 , уже конвертировалась во вторую конфигурацию Q_2 ,

увеличив концентрацию дивакансий с уровнем E_2 . Тогда концентрация дивакансий в состоянии Q_2 в n -Si равна

$$N_v = N_2 + n_1(T, E_2). \quad (5)$$

Можно учесть изменение в уравнении (3) концентрации дивакансий в состоянии Q_1 в n -Si:

$$N_v = N_1 - n_1(T, E_1). \quad (6)$$

Определим скорость конфигурационного перехода дивакансии из одной конфигурации в другую и, наоборот, в виде дифференциала (d/dT) функции $n_1(T, E_i)$, которая определяется уравнением (3) с $N_d \leq N_a$. Таким образом, скорость ($dn_1(T, E_i)/dT$) конфигурационного перехода дивакансии изменяет скорость и интервал перезарядки акцепторных уровней дивакансии, смещая его согласно (5) в область комнатных температур и с учетом уравнения (6) – в область температуры 77 К.

В экспериментальной работе [9] согласно температурной зависимости концентрации электронов в n -Si (Fz), облученном γ -квантами ^{60}Co ,

определена концентрация $N = 1,3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3} V_2^{-0}$ с уровнем $E_c - 0,424 \text{ эВ}$, а после ультразвуковой обработки (УЗО) концентрация $N_1 = 1,7 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ возросла. Естественно предположить, что в работе наблюдался обобщенный уровень дивакансии V_2^{-0} . Предположим, что в образец кремния были введены дивакансии в конфигурации с большей ($E_c - 0,426 \text{ эВ}$) и с меньшей ($E_c - 0,42 \text{ эВ}$) дисторсиями с равными концентрациями N . В случае перехода дивакансии из конфигурации Q_1 в Q_2 полностью (1:1) без захвата электрона из зоны проводимости наблюдается обобщенный уровень дивакансии V_2^{-0} с концентрацией $N = 1,3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (рис. 1,а); если частично (1/0,7), то наблюдается обобщенный уровень дивакансии V_2^{-0} с концентрацией $N_1 = 1,7 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (см. рис. 1,б). Результаты вычислений обобщенного уровня отрицательно заряженной дивакансии V_2^{-0} в образце n -Si, облученном γ -квантами ^{60}Co до и после УЗО, приведены в табл. 2.

Таблица 2

Параметры расчета концентрации электронов в зоне проводимости в n -Si (Fz) ($n_0 = 4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) при наличии акцепторных уровней дивакансии V_2^{-0} в первой и во второй конфигурациях в отношении 1:1 и обобщенного уровня $E_c - 0,424 \text{ эВ}$ дивакансии в образце до и после УЗО

Воздействие	$N_d \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$N_a \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$8n_a \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$8n_d \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$E_c - E_a, \text{ эВ}$	Отношение концентраций
–	6,1	1,3	-1,3	-1,3	0,426	$N_a^{(0,426/0,42)} = 1,0$
γ - ^{60}Co	4,8	1,3	+1,3	–	0,42	$8n_a / N_a = 1,0$
–	4,8	1,3	–	–	0,424	–
–	5,7	1,3	-0,9	-0,9	0,426	–
γ - ^{60}Co	4,4	1,3	+0,9	–	0,42	$N_a^{(0,426/0,42)} = 1,0$
УЗО	4,8	1,7	–	–	0,424	$8n_a / N_a = 0,7$

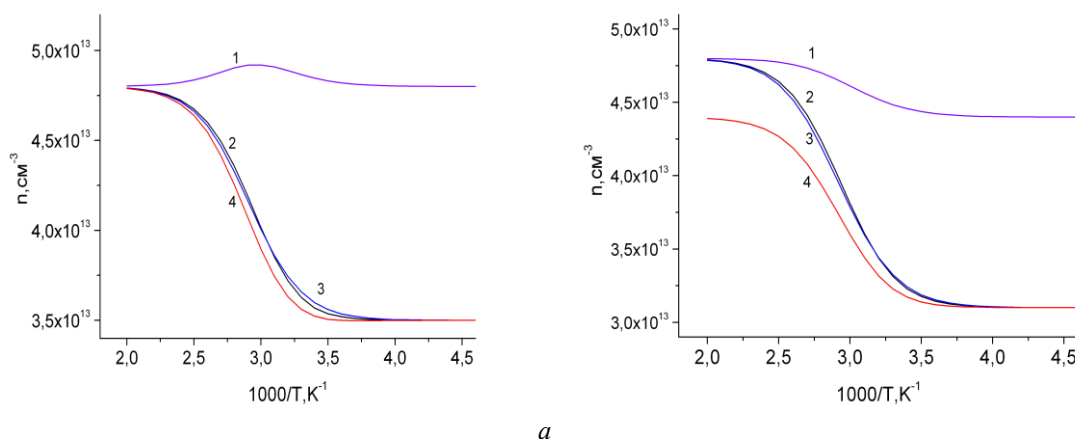


Рис. 1. Температурные зависимости концентрации электронов ($n_0 = 4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) при наличии акцепторных уровней дивакансии в n -Si (Fz): 1 – $E_c - 0,426 \text{ эВ}$, 2 – $E_c - 0,426 \text{ эВ}$ и $E_c - 0,42 \text{ эВ}$ дивакансии в Q_1 и Q_2 конфигурациях; 3 – обобщенного $E_c - 0,424 \text{ эВ}$ уровня V_2^{-0} ; 4 – $E_c - 0,42 \text{ эВ}$. Вероятность конфигурационного перехода ($\Delta n_a / N_a$) дивакансии из первой конфигурации во вторую: а – 1,0; б – 0,7 (УЗО)

Таким образом, после УЗО частичный переход нейтральной дивакансии V_2^{-0} из конфигурации $Q_1 \rightarrow Q_2$ привел к увеличению концентрации обобщенного уровня. Предположим, что дважды отрицательные дивакансии V_2^{2-} увеличили концентрации в 1,3 раза сразу после воздействия

ультразвука. В данном случае концентрации дивакансий V_2^{2-} в конфигурациях Q_1 и Q_2 равны.

Определим концентрацию электронов в зоне проводимости n -Si в зависимости от температуры при наличии уровней дивакансии в запрещенной зоне в Q_1 и Q_2 конфигурациях в двух зарядовых состояниях согласно уравнению (4):

$$n(T) = n_1(T) + n_2(T) + n_3(T) - N_d^2(T) - N_d^3,$$

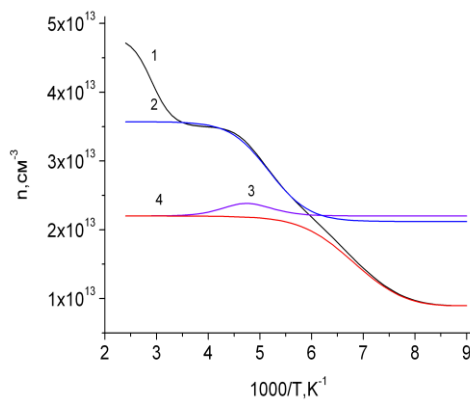
$$N_d^2(T) = N_d^2 - n_v(T). \quad (7)$$

Согласно уравнению (3) $n_1(T)$ – обобщенный уровень $E_c-0,424$ эВ дивакансии $V_2^{-/0}$; $n_2(T)$ – уровень $E_c-0,261$ эВ дивакансии $V_2^{2-/}$ в конфигурации Q_1 и N_d^2 – концентрация свободных доноров; $n_3(T)$ – уровень $E_c-0,17$ эВ дивакансии в конфигурации Q_2 и N_d^3 – концентрация свободных доноров. Функция $n_v(T)$ определяется уравнением (3) с $N_d \leq N_a$ и уровнем $E_c-0,261$ эВ.

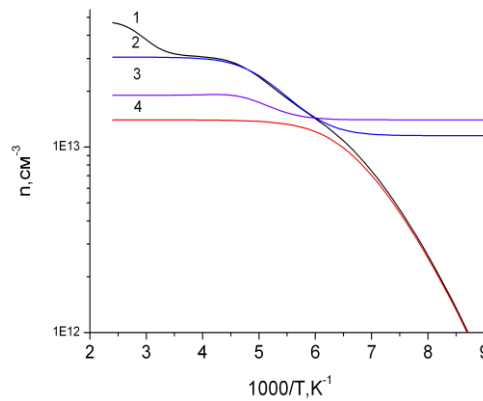
Температурные зависимости концентрации электронов в n -Si (Fz) ($n_0 = 4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) были вычислены по уравнению (7) до (рис. 2,а) и после УЗО (см. рис. 2,б). В запрещенной зоне кремния лежали акцепторные уровни – $E_c-0,261$ эВ и

$E_c-0,17$ эВ дивакансии $V_2^{2-/}$ в Q_1 и Q_2 конфигурациях и $E_c-0,424$ эВ – обобщенный уровень дивакансии $V_2^{-/0}$. Сравнение с экспериментальной температурной зависимостью концентрации электронов в n -Si (Fz) ($n_0 = 4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) [9] позволило оценить концентрацию P_s-C_i до ($N = 3,75 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) и после ($N_1 = 1,3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) УЗО образцов кремния. Таким образом, УЗО облученных образцов кремния, хотя и временно, но удалила C_i от P_s в межузельное положение.

Результаты вычислений обобщенного $E_c-0,23$ эВ уровня дважды отрицательно заряженной дивакансии $V_2^{2-/}$ в образце n -Si, облученном γ -квантами ^{60}Co до и у после УЗО, приведены в табл. 3.



а



б

Рис. 2. Температурные зависимости концентрации электронов ($n_0=4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) при наличии акцепторных уровней дивакансии в n -Si (Fz): 1 – $E_c-0,424$ эВ, $E_c-0,261$ эВ и $E_c-0,17$ эВ дивакансии в Q_1 и Q_2 конфигурациях; 2 – обобщенного $E_c-0,23$ эВ уровня $V_2^{2-/}$; 3 – $E_c-0,261$ эВ; 4 – $E_c-0,17$ эВ. Вероятность конфигурационного перехода ($\Delta n_d/N_a$) дивакансии из первой конфигурации во вторую: а – 1,0; б – 0,7 (УЗО)

Таблица 3

Параметры расчета концентрации электронов в зоне проводимости в n -Si (Fz) ($n_0 = 4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) при наличии акцепторных уровней дивакансии $V_2^{2-/}$ в первой и во второй конфигурациях в отношении 1:1 и обобщенного уровня $E_c-0,23$ эВ дивакансии в образце до и после УЗО

Воздействие	$N_d \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$N_a \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$8n_a \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$8n_d \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$E_c-E_a,$ эВ	Отношение концентраций
–	4,8	1,3	–	–	0,424	$N_a^{(0,261/0,17)} = 1,0$
γ - ^{60}Co	3,5	1,3	-1,3	-1,3	0,261	$8n_a / N_a = 1,0$
–	2,2	1,3	+1,3	–	0,17	–
–	3,57	1,45	–	–	0,23	–
–	4,8	1,7	–	–	0,424	–
γ - ^{60}Co	3,1	1,7	-1,2	-1,2	0,261	–
УЗО	1,4	1,7	+1,2	–	0,17	$N_a^{(0,261/0,17)} = 1,0$
–	3,05	1,9	–	–	0,23	$8n_a / N_a = 0,7$

При вычислениях концентрации электронов в зоне проводимости в n -Si (Fz) предполагалось, что при облучении γ -квантами ^{60}Co в образцах кремния образуются дивакансии в конфигурациях Q_1 и Q_2 с равными концентрациями. А при облучении p -Si быстрыми нейтронами реактора концентрация дивакансий в конфигурации Q_2 с меньшей дисторсией в $\sim 2,33$ раза больше, чем концентрация дивакансий в конфигурации Q_1 с большей дисторсией. Этот вывод получен в [12] из анализа

предельного положения уровня Ферми с дозой облучения.

В [14] после облучения n -Si (Fz) ($\rho = 3 \text{ кОм} \cdot \text{см}$) 14,1 МэВ нейтронами были определены скорости введения дивакансий с уровнями $E_c-0,24$ эВ ($\eta = 0,22 \text{ см}^{-1}$) и $E_c-0,42$ эВ ($\eta = 0,71 \text{ см}^{-1}$). А при облучении этих образцов γ -квантами ^{60}Co определены скорости введения в n -Si (Fz) ($\rho = 3 \text{ кОм} \cdot \text{см}$) дивакансий с уровнями $E_c-0,22$ эВ ($\eta = 0,789 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$) и $E_c-0,42$ эВ ($\eta = 0,842 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$).

Можно предположить, что в кремнии наблюдались обобщенные уровни дивакансии. Поэтому при описании температурной зависимости концентрации электронов в зоне проводимости в этих образцах кремния предположим, что при облучении вводятся только дивакансии в конфигурациях Q_1 и Q_2 . Отношения между обобщенными уровнями дивакансии должны соответствовать экспериментальным. Вычисления температурной зависимости концентрации электронов проводим

согласно уравнениям (3)–(7). Описаны температурные зависимости концентрации электронов в n^0 - и γ -облученных образцах n -Si (рис. 3).

Результаты вычислений $E_c-0,23$ эВ обобщенного уровня дважды отрицательно заряженной дивакансии V_2^{2-} в образце n -Si, n^0 -облученном и облученном γ -квантами ^{60}Co , представлены в табл. 4.

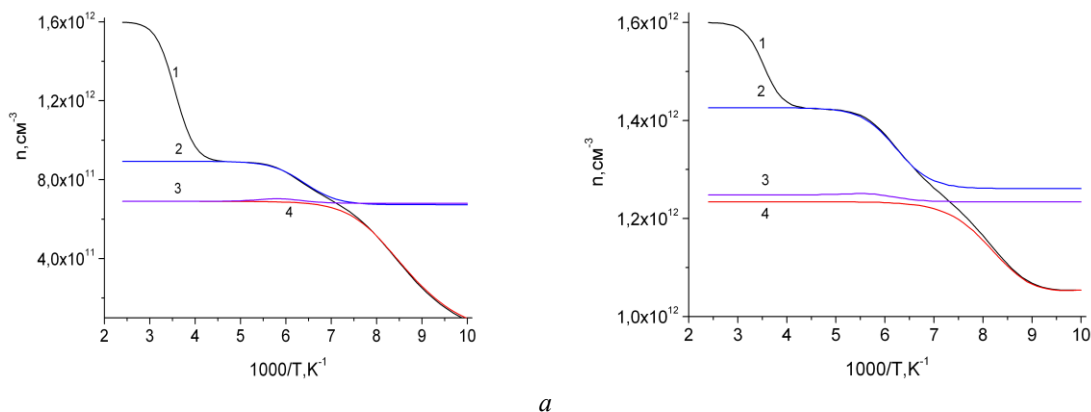


Рис. 3. Температурные зависимости концентрации электронов ($n_0 = 1,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$) при наличии акцепторных уровней дивакансии в n -Si (Fz): 1 – $E_c-0,424$ эВ, $E_c-0,261$ эВ и $E_c-0,17$ эВ дивакансии в Q_1 и Q_2 конфигурациях; 2 – обобщенного $E_c-0,23$ эВ уровня V_2^{2-} ; 3 – $E_c-0,261$ эВ; 4 – $E_c-0,17$ эВ. Вероятность конфигурационного перехода ($\Delta n_d/N_d$) дивакансии из первой конфигурации во вторую: а – 0,3 (n^0); б – 1,1 (γ)

Таблица 4
 Параметры расчета концентрации электронов в зоне проводимости в n -Si (Fz) ($n_0 = 1,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$) при наличии акцепторных уровней дивакансии V_2^{2-} в конфигурациях Q_1 и Q_2 в отношении 0,3 и 1,1 в образце, облученном нейтронами (14,1 МэВ) и γ -квантами ^{60}Co соответственно

Воздействие	$N_d \cdot 10^{-11}, \text{ см}^{-3}$	$N_a \cdot 10^{-11}, \text{ см}^{-3}$	$8n_a \cdot 10^{-11}, \text{ см}^{-3}$	$8n_d \cdot 10^{-11}, \text{ см}^{-3}$	$E_c-E_a, \text{ эВ}$	Отношение концентраций
–	16	7,1	–	–	0,424	$N_a^{(0,261/0,17)}=0,3$
$E(n^0)=$	8,9	2,1	-2	-2	0,261	$8n_a / N_a=0,95$
14,1 МэВ	6,8	7,1	+2	–	0,17	–
–	8,93	2,2	–	–	0,23	–
–	16	1,76	–	–	0,424	–
γ - ^{60}Co	14,24	1,9	-1,76	-1,76	0,261	–
–	12,34	1,76	+1,76	–	0,17	$N_a^{(0,261/0,17)}=1,1$
–	14,26	1,65	–	–	0,23	$8n_a / N_a=0,93$

После γ -облучения n -Si [14] в образцах наблюдались обобщенные уровни дивакансии в отрицательном и дважды отрицательном состояниях $E_c-0,42$ и $E_c-0,22$ эВ почти в равных концентрациях. При понижении температуры образца n -Si происходит перезарядка нейтрального уровня дивакансий, и при захвате электрона на орбиталь e_u уровня дивакансии образуется $V_2(D_{3d})$, а на орбиталь $a_{1g} - V_2(C_{2h})$. При равновероятном захвате электрона на уровень $E_c-0,261$ эВ V_2^{2-} с большей дисторсией и на уровень $E_c-0,17$ эВ с меньшей дисторсией образуется обобщенный уровень $E_c-0,23$ эВ дивакансии, обусловленный высокой скоростью переброски связей между конфигурациями $V_2(D_{3d})$ и $V_2(C_{2h})$. Скорость переброски связей ($dn_1(T, E_i)/dT$) определяет концентрацию обобщенного $E_c-0,23$ эВ уровня V_2^{2-} .

Вычисления температурной зависимости концентрации электронов показали (см. табл. 4), что концентрация дивакансий с уровнем $E_c-0,261$ эВ в конфигурации с большей дисторсией в $\sim 1,1$ раза больше, чем концентрация дивакансий с уровнем $E_c-0,17$ эВ в конфигурации с меньшей дисторсией в γ -облученных образцах. В образцах, облученных нейтронами (14,1 МэВ) концентрация дивакансий с уровнем $E_c-0,261$ эВ в конфигурации с большей дисторсией составила $\sim 0,3$ доли концентрации дивакансий с уровнем $E_c-0,17$ эВ в конфигурации с меньшей дисторсией. Нейтроны с энергией 14,1 МэВ создают в образцах n -Si кластеры дефектов с высокой концентрацией дивакансий, в проводящей матрице решетка релаксирует, деформационное поле вокруг дивакансий в проводящей матрице ослабевает. Поэтому концентрация дивакансий с уровнем $E_c-0,17$ эВ в

конфигурации с меньшей дисторсией в $\sim 3,3$ раза больше, чем концентрация дивакансий с уровнем $E_c-0,261$ эВ в конфигурации с большей дисторсией.

Как видно (см. рис. 1,а–3,а (кривые 1, 3)), наблюдается всплеск концентрации электронов в проводящей матрице n -Si (Fz) при полной конверсии V_2 (D_{3d}) из Q_1 в Q_2 конфигурацию.

Такой всплеск наблюдался в p -Si (Fz), облученном быстрыми нейтронами реактора [11, 12], что свидетельствует о переходе V_2^{+0} из конфигурации с большей дисторсией в меньшую. Конверсия дивакансий происходила после захвата дырки на уровень $E_v+0,365$ эВ.

В n -Si (Fz) этот всплеск концентрации электронов в образце можно связать с высокой скоростью перехода из Q_1 в Q_2 конфигурацию по сравнению со скоростью захвата электрона на уровень $E_c-0,261$ эВ.

ВЫВОДЫ

Ультразвуковое воздействие на γ -облученные образцы n -Si (Fz) временно увеличивает концентрации дивакансий с обобщенным уровнем $E_c-0,424$ эВ V_2^{-0} и, возможно, $E_c-0,23$ эВ $V_2^{2/-}$.

Определена концентрация уровня $E_c-0,23$ эВ, которая принадлежит дивакансии и относится к дефекту P_s-C_i до и после ультразвуковых стимуляций образцов кремния. Ультразвук удаляет C_i от атомов фосфора P_s в междоузельное положение, уменьшая концентрацию P_s-C_i в ~ 3 раза. Образование кластеров дефектов в n -Si увеличивает концентрацию дивакансий в конфигурации с меньшей дисторсией по сравнению с конфигурацией с большей дисторсией в проводящей матрице образца. Предположено, что это связано с релаксацией решетки в проводящей матрице кремния. В γ -облученных образцах n -Si (Fz) дивакансии находятся в почти равных концентрациях в Q_1 и Q_2 конфигурациях.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. G.D. Watkins, J.W. Corbett. Defects in irradiated silicon: Electron paramagnetic resonance of divacancy // *Phys. Rev.* 1965, v. 138, N 2A, p. 543-544.
2. E.G. Sieverts, S.H. Muller, and C.A.J. Ammerlaan. Divacancy in silicon: hyperfine interaction from electron-nuclear double-resonance measurements II // *Phys. Rev. B.* 1978, v. 18, N 12, p. 6834-6848.

3. U. Lindefelt, Wang Yong-Liang. First- and second-nearest-neighbor divacancies in silicon: Origin and ordering of gap levels II // *Phys. Rev. B.* 1988, v. 38, N 6, p. 4107-4112.

4. George D. Watkins. Intrinsic defects in silicon // *Mat. Sci. in Semic. Proc.* 2000, v. 3, p. 227-235.

5. M. Moll, H. Feick, E. Fretwurst, G. Lindstrom, C. Schutze. Comparison of defects produced by fast neutrons and ^{60}Co -gammas in high-resistivity silicon detectors using deep-level transient spectroscopy // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A.* 1997, v. 388, N 3, p. 335-339.

6. M. Asghar, M. Zafar Iqbal, N. Zafar. Characterization of deep levels introduced by alpha radiation in n-type silicon // *J. Appl. Phys.* 1993, v. 73, N 8, p. 3698-3708.

7. B.G. Svensson, B. Mohadjeri, A. Hallen, J.H. Svensson, J.W. Corbett. Divacancy acceptor levels in ion-irradiated silicon // *Phys. Rev. B.* 1991, v. 43, N 3, p. 2292-2298.

8. M. Moll, E. Fretwurst, M. Kuhnke, G. Lindstrom. Relation between microscopic defects and macroscopic changes in silicon detector properties after hadron irradiation // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* 2002, v. 186, p. 100-110.

9. Ya.M. Olikh, N.D. Timochko, and A.P. Dolgoenko. Acoustic-wave-stimulated transformations of radiation defects in γ -irradiated n -type silicon crystals // *Technical Physics Letters.* 2006, v. 32, N 7, p. 586-589.

10. С.С. Моливер. Метод открытой оболочки для электронной структуры дивакансии кремния // *ФТТ.* 1999, т. 41, №3, с. 404-410.

11. 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.

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

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

14. M. Moll, H. Feick, E. Fretwurst, G. Lindstrom, C. Schutze. Comparison of defects produced by fast neutrons and ^{60}Co -gammas in high-resistivity silicon detectors using deep-level transient spectroscopy // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A.* 1997, v. 388, p. 335-339.

Статья поступила в редакцию 18.04.2017 г.

КОНФІГУРАЦІЙНА ПЕРЕБУДОВА ДИВАКАНСІЇ ПІД ВПЛИВОМ УЛЬТРАЗВУКОВИХ СТИМУЛЯЦІЙ

О.П. Долголенко

Описана температурна залежність концентрації електронів у опромінених γ -квантами ^{60}Co кристалах n -типу кремнію, пов'язана з перезарядкою двічі і негативно зарядженої дивакансії в процесі її конфігураційної перебудови з однієї конфігурації з більшою дисторсией в конфігурацію з меншою дисторсией. Показано, що експериментальне спостереження узагальненого рівня $E_c-0,23$ еВ дивакансії можливо тільки в процесі її конфігураційної перебудови. Експериментально спостерігалось, що концентрація $V_2^{2/-}$ з рівнем $E_c-0,261$ еВ визначається не тільки видом і дозою ядерного випромінювання, але і залежить від рівня легування кристалів кремнію. Визначено швидкість конфігураційної перебудови

дивакансії з однієї конфігурації з більшою дісторсией в конфігурацію з меншою дісторсией як функція енергії і температури її перезарядки. Виявлено, що ультразвукова обробка опромінених γ -квантами зразків n -Si посилює міграцію межузельних атомів (C_i), руйнуючи радіаційні дефекти (P_s-C_i), але зменшує ймовірність конфігураційної перебудови дивакансії з однієї конфігурації з більшою дісторсией в конфігурацію з меншою дісторсией.

CONFIGURATION DIVACANCIES RESTRUCTURING UNDER THE INFLUENCE ACOUSTIC-WAVE STIMULATION

A.P. Dolgolenko

The temperature dependence of the electron density in the crystals of n-type silicon irradiated γ -rays ^{60}Co associated with double and negatively charged divacancy in the process of restructuring of a configuration with more distortion in the configuration with less distortion was described. The experimental observation of a generalized level $E_c-0.23$ eV divacancy is only possible in the process of restructuring its configuration was shown. Experimentally observed, that the concentration of the level V_2^{2-} $E_c-0.261$ eV determined by not only the type and dose of nuclear radiation, but also depends on the level of doping of silicon crystals. In γ -rays irradiated samples n-Si the speed of adjustment divacancy from configuration with more distortion in the configuration with less distortion is determined as a function of energy and its recharge temperature. Ultrasonic treatment of n-type silicon crystals irradiated γ -rays ^{60}Co enhances the migration of interstitial atoms (C_i), destroying radiation defects (P_s-C_i), but also reduces the likelihood of divacancies configuration adjustment from one configuration with a greater distortion in configuration with less distortion was found.