= РАДІАЦІЙНА ФІЗИКА=

УДК 621.315.592.3:546.28:539.12.04

А. П. Долголенко

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев

ПОДВИЖНОСТЬ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА ПРИ КОНФИГУРАЦИОННОЙ ПЕРЕСТРОЙКЕ ДИВАКАНСИЙ В КРЕМНИИ

Рассмотрена температурная зависимость подвижности электронов и дырок в высокоомном кремнии, выращенном методами Чохральского и бестигельной зонной плавки, после облучения быстрыми нейтронами реактора. В рамках уточненной модели кластеров дефектов описана температурная зависимость концентрации электронов и дырок в образцах кремния. Показано, что изменение конфигурации дивакансий в кластерах дефектов и в проводящей матрице приводит к росту высоты дрейфовых барьеров и концентрации длинноволновых фононов в проводящей матрице образцов кремния.

Ключевые слова: кремний, быстрые нейтроны, дивакансия, подвижность носителей.

Введение

К числу наиболее изученных собственных дефектов в кремнии можно отнести дивакансию (V_2) . В кремнии с решеткой типа алмаза дивакансии создают шесть оборванных связей и являются амфотерными центрами и могут находиться в четырех или в пяти зарядовых состояниях в зависимости от их конфигураций.

Метод молекулярных орбиталей подтвердил результаты метода функционала плотности и представление о двухъямном потенциале дивакансии в нейтральном и заряженных состояниях в кремнии [1]. В кремнии и германии рассмотрены эксперименты, которые можно объяснить как конфигурационные переходы дивакансии с большей дисторсии в меньшую и наоборот, а также приведены значения энергетических уровней дивакансии в кремнии и германии в разных конфигурациях [2, 3].

Свойства полупроводников с кластерами дефектов в качественном отношении отличаются от свойств тех же материалов с равномерно введенными простыми дефектами [4]. Известно, что кластеры дефектов равновероятно вводятся быстрыми нейтронами, а геометрическое перекрытие учитывается экспоненциальным способом. Но с понижением температуры образца надо учитывать дополнительное перекрытие областей пространственного заряда кластеров дефектов [5]. Экспериментальное определение показателя степени из температурной зависимости подвижности носителей заряда показало, что его значение значительно больше 3/2 и подвижность электронов в n-Si экспоненциально зависит от температуры. Такое поведение подвижности носителей заряда А. Я. Шик [6] объяснил перекрытием областей пространственных зарядов кластеров дефектов и образованием дрейфовых барьеров.

Чтобы понять, как кластеры дефектов влияют на электрофизические свойства полупроводников, в частности на подвижность носителей заряда, необходимо не только знать свойства простых дефектов, но и как на эти свойства влияют конфигурационные перестройки дефектов.

Экспериментальные результаты

В работе исследовались образцы n-Si (n_o = $=5.6 \cdot 10^{12}$ см⁻³), выращенные методом Чохральского, и образцы p-Si ($p_0 = 7,09 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$), выращенные методом бестигельной зонной плавки, после облучения $3 \cdot 10^{12}$ см⁻² и $3 \cdot 10^{13}$ см⁻² флюенсами быстрых нейтронов реактора соответственно. Облучение проводилось на горизонтальном канале реактора ВВР-М при комнатной температуре при потоке $5 \cdot 10^8 \text{ n}^0/(\text{см}^2 \cdot \text{ c})$. Поток быстрых нейтронов с точностью ~10 % был определен пороговым детектором ³²S (пороговая энергия $E = 0.95 \text{ M}_{3}B$) и приведен к энергии нейтронов начиная с ~100 кэВ согласно теоретическому спектру нейтронов. Измерения проводимости и коэффициента Холла были выполнены стандартным компенсационным методом на крестообразных образцах с точностью ~1 и~3 % соответственно. Образцы p-Si были измерены после отжига при температуре 325 ^{\circ}С в течение 30 мин.

На рис. 1 - 3 представлены кинетические коэффициенты n-Si и p-Si образцов, облученных быстрыми нейтронами реактора после отжига при различных температурах.

Вычисление температурной зависимости дрейфовых барьеров движения электронов будет рассмотрено ниже по тексту.



Рис. 1. Температурная зависимость концентрации и подвижности электронов в образце n-Si ($n_0 = 5, 6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$), облученного быстрыми нейтронами реактора флюенсом $3 \cdot 10^{12} \text{ n}^0 \text{ см}^{-2}$ после отжига при температуре (292 K) в течение 20 ч. – эксперимент; – расчет концентрации (*a*) и подвижности (*б*) электронов будет представлен дальше по тексту.



Рис. 2. Температурная зависимость концентрации и подвижности носителей в образце p-Si ($p_0 = 7,09 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$), облученного быстрыми нейтронами реактора флюенсом $3 \cdot 10^{13} \text{ n}^0 \text{ см}^{-2}$ после отжига при температуре $325 \, {}^0\text{C}$ в течение 30 мин. – эксперимент; – расчет концентрации дырок (*a*) будет изложен ниже по тексту; ~ - огибающая подвижности дырок (*б*).



Рис. 3. Температурная зависимость дрейфовых барьеров в проводящей матрице n-Si ($n_0 = 5,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, Cz), облученного быстрыми нейтронами реактора флюенсом 3 $\cdot 10^{12} \text{ n}^0 \text{ см}^{-2}$, <n>/n = 0,93758. \Box – расчет эксперимента; — огибающая.

Основные формулы расчета

Известно, что быстрые нейтроны кроме точечных дефектов в кремнии образуют их скопления, окруженные областями пространственного заряда. Дополнительное перекрытие кластеров дефектов, обусловленное перезарядкой введенных точечных дефектов, можно учесть с помощью интеграла перекрытия [5]

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

где Σ_1 – вероятность перекрытия кластеров дефектов, см⁻¹; f_0 – доля объема, занятого кластерами дефектов. При этом учитывается только геометрическое перекрытие 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

$$f = (1 - \exp(-\Sigma V \Phi)) \cdot \exp(-\Sigma_1 V \Phi), \qquad (2)$$

где V объем среднестатистического кластера дефектов, см⁻³; Φ - флюенс быстрых нейтронов, $n^{0} \cdot cm^{-2}$; $\Sigma = N \cdot \sigma$ – макроскопическая, см⁻¹ и σ – микроскопическая вероятности образования кластеров дефектов в кремнии, см², N – концентрация атомов кремния, см⁻³.

Вероятность дополнительного перекрытия областей пространственного заряда кластеров значительно меньше вероятности образования кластеров: $\Sigma_1 \ll \Sigma$. Тогда, исходя из модели Госсика, получим эффективную концентрацию носителей [5]

$$n_{ef}(T, \Phi) =$$

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

где $N_2(T, \Phi)$ – концентрация экранирующих центров в областях пространственного заряда кластеров дефектов; μ – положение уровня Ферми в центре кластера относительно дна зоны проводимости; R_1 – средний радиус областей скопления дефектов. $N_c(T)$ – эффективная плотность состояний в зоне проводимости; $n(T, \Phi)$ - концентрация носителей в проводящей матрице кремния; ε и ε_0 – диэлектрические постоянные материала и вакуума соответственно; q – заряд носителя тока. Уравнения для определения R_1 , μ в рамках уточненной модели Госсика даны в работах [7, 8].

С уменьшением температуры образца акцепторные дефекты в области пространственного заряда кластеров частично перезаряжаются, что уменьшает экранирующий эффект положительно заряженных доноров и приводит к еще большему перекрытию кластеров дефектов. Тогда зависимость вероятности перекрытия от температуры можно представить как [5]

$$\Sigma_{1}(T) = \Sigma_{0} \exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right), \qquad (4)$$

где Σ_0 – геометрическая вероятность перекрытия кластеров дефектов; ΔE – приращение свободной энергии системы "кластер - матрица".

Рассмотрим полупроводник n-Si, легированный атомами фосфора, с чистой концентрацией N_d и средней степенью компенсации акцепторами (бор) в области температур от комнатной до температуры жидкого азота. Пусть нейтроны равномерно создают точечные дефекты акцепторного типа (кроме разупорядоченной области) с концентрацией $N_a < N_d$. Будем считать n-Si невырожденным ($N_d < 10^{14}$ см⁻³). Тогда при повышении температуры образца n-Si от 77 К будем иметь некоторую концентрацию электронов в зоне проводимости за счет теплового возбуждения электронов с уровня E_a как в проводящей матрице $n(T, \Phi)$, так и в области пространственного заряда кластеров дефектов $N_2(T, \Phi)$ [5]

$$n(T, \Phi, E_a) = \frac{1}{2} \left(N_d - \frac{N_a(\Phi)}{\lambda} - n_{11} \right) \times \left(\sqrt{1 + \frac{4N_d n_{11}}{\left(N_d - \frac{N_a(\Phi)}{\lambda} - n_{11} \right)^2}} + 1 \right);$$
$$n_{11} = g N_c(T) \exp\left(-\frac{E_a}{\lambda kT}\right), \qquad (5)$$

где $g = 2 - \phi$ актор вырождения акцепторного уровня; $N_a(\Phi)$ – концентрация радиационновведенных акцепторных дефектов после облучения флюенсом Ф. Тогда n_{11} – концентрация электронов в зоне проводимости n-Si, когда уровень Ферми совпадает с уровнем E_a и E_a/λ (виртуальный уровень), который находится в матрице ($\lambda = 1$) и в пространственно-заряженной области кластера дефектов ($\lambda = 1,5$) соответственно [4].

Рассмотрим область температур (T > 100 K), 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 > 100 K равна [9]

$$\mu_{H} = A_{\mathrm{I}}\mu_{d} \exp\left(-\frac{E_{V}}{kT}\right) \cdot \frac{(1-\delta)}{1+Bf} \frac{n}{}, \qquad (6)$$

где μ_d - дрейфовая подвижность носителей до облучения; $A_1 - xолл$ -фактор в образце до облучения с учетом диффузного движения электронов [10]; f – доля объема диэлектрических включений (кластеров); B – коэффициент поляризации кластеров дефектов в электрическом поле [9]; $E_v = C_n$ - ζ – средняя величина дрейфовых барьеров, определяемая как разность энергии

между "уровнем протекания" (C_n) и уровнем химического потенциала (ζ).

Согласно Herring [11], изменение подвижности носителей равно $\delta = \varepsilon/3$, где ε – среднеквадратичное отклонение концентрации основных носителей от среднего значения <n>. 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

$$\delta = \frac{f \cdot F}{3} \,, \tag{7}$$

где F – доля объема «озер», где отсутствует объемный заряд.

В случае p-Si, заменив доноры на акцепторы, а акцепторы на доноры, аналогично уравнению (5) получим концентрацию дырок в валентной зоне p-Si при повышении температуры образца от 77 К.

Экспериментальные величины и расчетные значения на основе формул (3), (5), (6) в n-Si и (5) в p-Si температурных зависимостей кинетических коэффициентов в кремнии, облученного быстрыми нейтронами реактора после отжига при различных температурах, представлены на рис. 1 и 2. Максимальное отклонение экспериментальных значений концентрации носителей в n-Si от расчетного не превышает 6 %, а в среднем 1 %. В p-Si такое отклонение в два раза выше даже без учета температурной области конфигурационной перестройки дивакансий (см. рис. 1, а и 2, а). Вычисления велись в рамках уточненной модели Госсика с учетом, что Σ = = 0,15 см⁻¹, Σ_1 = 0, μ = E_c - 0,509 эВ. В результате вычислений в n-Si, например при температуре 292 К, получены значения: В = 0,0948, f = 0,4419, $F = 0,558, \Psi_p = 0,122$ эВ (высота потенциального барьера среднего кластера), $R_2 = 6,76 \cdot 10^{-5}$ см (протяженность области пространственного заряда кластера). Концентрации радиационных дефектов и их энергетические уровни в запрещенной зоне кремния представлены в таблице.

Вычисленная концентрация (N_a, N_d) и энергия уровней (E_a, E_d) акцепторных и донорных дефектов в n-Si (n_o = 5,6 · 10¹² cm⁻³) и в p-Si (p_o = 7,09 · 10¹¹ cm⁻³) соответственно; N_b - концентрация носителей в кремнии после облучения быстрыми нейтронами реактора флюенсом (Ф) и отжига; R₁ - среднестатистический радиус кластера дефектов. Величины Ф, N_o, P_o – экспериментально измерены

Φ , n ^o cm ⁻²	N ₀ , см ⁻³	N _b , см ⁻³	N _a , см ⁻³	Е _с - Е _а , эВ	Т _{отж} , К	R ₁ · 10 ¹⁰ , м
3 · 10 ¹²	5,58 · 10 ¹²	$5,6 \cdot 10^{12}$	$1,8 \cdot 10^{12}$	0,51		
		$3,8 \cdot 10^{12}$	$1,7 \cdot 10^{12}$	0,261	292	70,0
		$2,1 \cdot 10^{12}$	$1,0 \cdot 10^{12}$	0,205		
		$1,1 \cdot 10^{12}$	$1,0 \cdot 10^{12}$	0,155		
Φ , n ^o cm ⁻²	Р _о , см ⁻³	N _b , см ⁻³	N _d , см ⁻³	E_v+E_d , $\Im B$	Т _{отж} , °С	
$3\cdot 10^{13}$	7,09 · 10 ¹¹	$3,6 \cdot 10^{13}$	$3\cdot 10^{13}$	0,365	325	
		$6 \cdot 10^{12}$	$6.7 \cdot 10^{12}$	0.283		

Обсуждение

Расчеты в рамках уточненной модели Госсика [7] показали, что при понижении температуры образца n-Si высота потенциального барьера кластера растет. Акцепторные дефекты (дивакансии) в областях их скопления перезаряжаются, что увеличивает протяженность пространственного заряда кластера дефектов и приводит к дополнительному перекрытию кластеров. К геометрическому перекрытию кластеров дефектов прибавляется дополнительное перекрытие их областей пространственного заряда. С уменьшением температуры образца акцепторные дефекты в областях пространственного заряда кластеров также частично перезаряжаются, что уменьшает экранирующий эффект положительно заряженных доноров и приводит к дополнительному перекрытию кластеров дефектов. Обычно при этом наблюдается уменьшение подвижности электронов в проводящей матрице из-за роста высоты дрейфовых барьеров (см. рис. 3) [2]. Если дивакансии в кластерах меняют конфигурацию, то не захваченные в кластеры электроны в проводящей матрице понижают дрейфовые барьеры и это приводит к росту подвижности электронов (см. рис. 1).

Расчет показал [3], что уровни радиационных дефектов $E_v + 0,21$ эВ и $E_v + 0,365$ эВ наблюдаются в равной концентрации, свидетельствуя о том, что эти дефекты находятся в одном и том же зарядовом состоянии (см. рис. 1, *a*). Можно предположить, что причина равности концентраций

дефектов является следствием определенной деформации решетки p-Si, обусловленной дефектами междоузельного типа.

Можно видеть, что в области температур (250 - 200) К в процессе измерений дивакансии переходят из Q_1 конфигурации в Q_2 с меньшей дисторсией. Поэтому концентрация квантов энергии возбуждения (фононов) колеблющейся решетки кремния растет и при понижении температуры подвижность дырок уменьшается. Среднее число фононов, имеющихся в решетке, пропорционально температуре (T, K) и поэтому с дальнейшим понижением температуры подвижность дырок снова растет (см. рис. 1, δ).

Заключение

В рамках уточненной модели Госсика описана температурная зависимость кинетических коэф-

- 1. *Моливер С.С.* Метод открытой оболочки для электронной структуры дивакансии кремния // ФТТ. 1999. Т. 41, № 3. С. 404 410.
- Долголенко А.П. Электронные уровни конфигураций дивакансий в кремнии // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. -2012. - № 5(81). - С. 13 - 20.
- Долголенко А.П. Электронные уровни конфигураций дивакансий в германии // Там же. 2013. № 5(87). С. 37 42.
- Dolgolenko A.P. Variation of Carrier Removal Rate with Irradiation Dose in Fast-Pile Neutron Irradiated n-Si // Phys. Stat. Sol. (a). - 2000. - Vol. 179. - P. 179 - 188.
- Dolgolenko A.P., Litovchenko P.G., Varentsov M.D. et al. Particularities of the formation of radiation defects in silicon with low and high concentration of oxygen // Phys. Stat. Sol. (b). - 2006. - Vol. 243, No. 8. -P. 1842 - 1852.
- 6. Шик А.Я. Эффект Холла и подвижности электронов в неоднородных полупроводниках // Письма

фициентов в n-Si и p-Si. Показано, что уменьшение подвижности электронов связано с перезарядкой дефектов в кластерах и ростом высоты дрейфовых барьеров за счет дополнительного перекрытия областей пространственного заряда кластеров дефектов. Дальнейший рост подвижности электронов, связанный с зависимостью длины дебаевого экранирования от температуры, обусловлен конфигурационным переходом дивакансий в кластерах из одной конфигурации в другую с меньшей дисторсией. Уменьшение подвижности дырок в p-Si связано с генерацией длинноволновых фононов при конфигурационной перестройке дивакансий в проводящей матрице. Рост подвижности дырок обусловлен тем, что концентрация фононов прямо пропорциональна температуре.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

ЖЭТФ. - 1974. - Т. 20, вып. 1. - С. 14 - 16.

- Dolgolenko A.P., Fishchuk I.I. A-Centres Build-up Kinetics in the Conductive Matrix of Pulled n-Type Silicon with Calculation of Their Recharges at Defect Clusters // Phys. Stat. Sol. (a). - 1981. - Vol. 67. -P. 407 - 411.
- Долголенко А.П., Гайдар Г.П., Варенцов М.Д., Литовченко П.Г. Радиационная стойкость п и р-Si, легированного кислородом и германием, при облучении высокоэнергетическими ядерными частицами // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. - 2009. - № 2(60). - С. 151 - 157.
- 9. Долголенко А.П. Кинетические коэффициенты в птипе кремния, облученном быстрыми нейтронами реактора // Там же. - 2011. - № 4. - С. 14 - 19.
- Шпинар Л.И., Ясковец И.И. К теории проводимости и эффекта Холла в неоднородных полупроводниках // ФТТ. - 1984. - Т. 26, вып. 6. - С. 1725.
- Herring Conyers. Effect of Random Inhomogeities on Electrical and Galvanomagnetic Measurements // J. Appl. Phys. - 1960. - Vol. 31, No. 11. - P. 1939 - 1953.

О. П. Долголенко

Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ

РУХЛИВІСТЬ НОСІЇВ ЗАРЯДУ ПРИ КОНФІГУРАЦІЙНІЙ ПЕРЕБУДОВІ ДИВАКАНСІЙ У КРЕМНІЇ

Розглянуто температурну залежність рухливості електронів і дірок у високоомному кремнії, вирощеному методами Чохральського та безтигельної зонної плавки, після опромінення швидкими нейтронами реактора. У рамках уточненої моделі кластерів дефектів описано температурну залежність концентрації електронів і дірок у зразках кремнію. Показано, що зміна конфігурації дивакансій у кластерах дефектів і провідній матриці призводить до зростання висоти дрейфових бар'єрів і концентрації довгохвильових фононів у провідній матриці зразків кремнію.

Ключові слова: кремній, швидкі нейтрони, дивакансія, рухливість носіїв.

A. P. Dolgolenko

Institute for Nuclear Research, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv

CHARGE CARRIER MOBILITY IN THE CONFIGURATION RESTRUCTURING DIVACANCIES IN SILICON

Temperature dependence of the mobility of electrons and holes in p-Si, cultivated by Czochralski method and бестигельной zone melting, after irradiation by fast neutrons reactor was considered. In the framework of the elaborated model of clusters defects the temperature dependence of the concentration of electrons and holes in silicon samples was described. It is shown that the configuration change divacancies in clusters of defects and in conducting matrix leads to increase in the height of the drift barriers and concentration long-wave phonons in conducting matrix samples of silicon.

Keywords: silicon, fast neutrons, divacancy, carrier mobility.

REFERENCES

- 1. *Moliver S.S.* // FTT. 1999. Vol. 41, No. 3. P. 404 410. (Rus)
- Dolgolenko A.P. // Voprosy atomnoj nauki i tekhniki. Ser. Fizika radiatsionnykh povrezhdenij i radiatsionnoe materialovedenie. - 2012. - No. 5(81). - P. 13 - 20. (Rus)
- Dolgolenko A.P. // Ibid. 2013. No. 5(87). P. 37 42. (Rus)
- Dolgolenko A.P. // Phys. Stat. Sol. (a). 2000. Vol. 179. - P. 179 - 188.
- Dolgolenko A.P., Litovchenko P.G., Varentsov M.D. et al. // Phys. Stat. Sol. (b). - 2006. - Vol. 243, No. 8. -P. 1842 - 1852.

- Shik A.Ya. // Pis'ma ZhETF. 1974. Vol. 20, Iss. 1. -P. 14 - 16. (Rus)
- Dolgolenko A.P., Fishchuk I.I. // Phys. Stat. Sol. (a). -1981. - Vol. 67. - P. 407 - 411.
- Dolgolenko A.P., Gajdar G.P., Varentsov M.D., Litovchenko P.G. // Voprosy atomnoj nauki i tekhniki. Ser. Fizika radiatsionnykh povrezhdenij i radiatsionnoe materialovedenie. - 2009. - № 2(60). - C. 151 -157. (Rus)
- Dolgolenko A.P. // Ibid. 2011. No. 4. P. 14 19. (Rus)
- 10. Shpinar L.I., Yaskovets I.I. // FTT. 1984. Vol. 26, Iss. 6. P. 1725. (Rus)
- 11. Herring Conyers. // J. Appl. Phys. 1960. Vol. 31, No. 11. P. 1939 1953.

Надійшла 06.02.2014 Received 06.02.2014