

ЭЛЕКТРОННЫЕ УРОВНИ КОНФИГУРАЦИЙ ДИВАКАНСИИ В ГЕРМАНИИ

А.П. Долголенко

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев, Украина

E-mail: odolgolenko@kinr.kiev.ua

Исследованы высокоомные образцы p-Si ($p_{00}=(1,63\dots7,09)\cdot 10^{11}$ см⁻³), выращенные методом бестигельной зонной плавки, после облучения быстрыми нейтронами реактора при 320 К. Определены энергетические уровни дивакансии в германии в трех зарядовых состояниях в зависимости от её конфигурации в кремнии. Рассмотрены эксперименты, которые можно объяснить как конфигурационные переходы дивакансии с большей дисторсии в меньшую и наоборот в кремнии и германии. Приведены значения энергетических уровней дивакансии в кремнии и германии в разных конфигурациях. Показано, что у радиационных дефектов в Ge отсутствуют донорные уровни, а энергия Hubbard у дефектов такая же, как и в Si. Уровень дивакансии $V_2(-/0)$ в Q_1 -конфигурации $E_v+0,085$ эВ определяет концентрацию дырок в валентной зоне p-Ge $2,2\cdot 10^{17}$ см⁻³ и положение уровня Ферми $E_v+0,125$ эВ в кластерах дефектов, созданных быстрыми нейтронами в Ge. Концентрация дефектов $\sim 2\cdot 10^{18}$ см⁻³ в кластерах образует примесную зону около валентной зоны шириной 0,08 эВ.

ВВЕДЕНИЕ

Облучение ядерными частицами является эффективным методом исследования в физике твердого тела. К настоящему времени стала очевидна необходимость уточнения электронных уровней дивакансии в запрещенной зоне не только в кремнии, но и в германии. Расчет методом молекулярных орбиталей [1] полностью подтвердил представление о двухъямном потенциале дивакансии в кремнии в нейтральном и заряженных состояниях. Известно, что при больших дозах облучения быстрыми нейтронами реактора уровень Ферми близок к середине запрещенной зоны кремния и расположен на нейтральном уровне дивакансии в первой конфигурации с сильной дисторсией [2]. Облучение монокристаллического германия p-типа большими дозами γ -квантов ⁶⁰Со и быстрыми нейтронами реакторного спектра показало, что предельное положение уровня Ферми изменилось от $\sim E_v+0,24$ до $E_v+0,125$ эВ соответственно [3]. Получение толстослойных релаксированных кристаллов Si_{1-x}Ge_x [4] позволило определить энергетические уровни дивакансии и других дефектов в запрещенной зоне в зависимости от концентрации Ge в Si n-, p-типов. В работах [4, 5] экспериментально показано, что с увеличением концентрации германия в кремнии уровни радиационных дефектов как акцепторные, так и донорные понижают свою энергию в запрещенной зоне. Энергия Hubbard между уровнями дивакансии $V_2(=/-)$ и $V_2(-/0)$ при увеличении концентрации германия в кремнии сохраняется $\approx 0,2$ эВ. Дивакансия в отрицательно-заряженном состоянии в верхней половине запрещенной зоны Si_{1-x}Ge_x ($x < 0,25$) привлекательна для захвата электрона, а в нижней половине запрещенной зоны ($x > 0,25$) – для захвата дырки. Наблюдалось отсутствие непрерывности $\sim 0,07$ эВ в положении $V_2(-/0)$ уровня дивакансии, когда он пересекает середину запрещенной зоны.

К настоящему времени стала очевидна необходимость экспериментально уточнить электронные

уровни дивакансии, А-центра, Е-центра в запрещенной зоне германия.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Образцы p-Si ($p_{00}=(1,63\dots7,09)\cdot 10^{11}$ см⁻³), выращенные методом бестигельной зонной плавки, были облучены ($5,0\cdot 10^{12}\dots 3\cdot 10^{13}$) n⁰-см⁻² флюенсом быстрых нейтронов реактора при температуре 320 К. Облучение проводилось в горизонтальном канале реактора ВВР-М. Поток ($1\cdot 10^{10}$ n⁰-см⁻²-с⁻¹) быстрых нейтронов был определен пороговым детектором ³²S с точностью 10 % и приведен к энергии нейтронов, начиная с ~ 100 кэВ. Измерения проводимости и постоянной Холла были выполнены с точностью 3 % методом Van der Pauw на квадратных образцах размером $10 \times 10 \times 1$ мм компенсационным способом. Контакты создавались втиранием алюминия на шлифованную поверхность кремния.

На рис. 1,а,б приведены температурные зависимости эффективной концентрации дырок в валентной зоне p-Si, облученного различными дозами быстрых нейтронов реактора после изохронного отжига длительностью 30 мин при различных температурах. Полученные результаты расчетов представлены в виде табл. 1–3. На рис. 2,а,б показана энтальпия ионизации дивакансии в различных зарядовых состояниях относительно зоны проводимости Si_{1-x}Ge_x в зависимости от концентрации германия (x) в кремнии [4].

СТАТИСТИКА ЗАПОЛНЕНИЯ ДОНОРНЫХ И АКЦЕПТОРНЫХ СОСТОЯНИЙ ДЕФЕКТОВ В p-Si

Рассмотрим полупроводник p-Si, легированный атомами бора с нескомпенсированной концентрацией N_a , в области температур от комнатной до температуры жидкого азота. Пусть быстрые нейтроны равномерно создают точечные дефекты донорного типа (кроме области скопления дефектов) с концентрацией $N_d < N_a$, а также вводят дефекты акцепторного типа. Будем считать p-Si невырожденным

($N_a < 10^{14} \text{ см}^{-3}$). Тогда при повышении температуры образца р-Si от 77 К будем иметь некоторую концентрацию дырок в валентной зоне за счет теплового возбуждения дырок с уровня E_d как в проводящей матрице $p_1(T, \Phi)$, так и в области пространственного заряда кластеров дефектов $P_3(T, \Phi)$. Из решения квадратичного уравнения получим температурную зависимость концентрации дырок в образце:

$$p_1(T, \Phi, E_d) = \frac{1}{2} \left(N_a - \frac{N_d(\Phi)}{\lambda} - p_{11}(E_d) \right) \times \left(\sqrt{1 + \frac{4N_a p_{11}(E_d)}{\left(N_a - \frac{N_d(\Phi)}{\lambda} - p_{11}(E_d) \right)^2}} + 1 \right),$$

$$p_{11}(E_d) = g N_V(T) \exp \left(-\frac{E_d}{\lambda k T} \right), \quad (1)$$

где $g = 2$ – фактор вырождения донорного уровня в р-Si; $N_d(\Phi)$ – концентрация радиационно введенных донорных дефектов после облучения флюенсом Φ ; $p_{11}(E_d)$ – концентрация дырок в валентной зоне р-Si, когда уровень Ферми совпадает с уровнем E_d в проводящей матрице или с эффективным уровнем E_d/λ в пространственно заряженной области кластера дефектов. Уравнение (1), полученное из решения квадратичного уравнения, вытекает из условия электронейтральности [6].

Аналогично при повышении температуры образца р-Si от 77 К будем иметь некоторую концентрацию дырок в валентной зоне за счет теплового возбуждения их с акцепторного уровня E_a как в проводящей матрице $p_0(T, \Phi)$, так и в области пространственного заряда кластеров дефектов $P_4(T, \Phi)$:

$$p_0(T, \Phi, E_a) = \frac{1}{2} p_{11}(E_a) \left(\sqrt{1 + \frac{4N_a(\Phi)}{p_{11}(E_a)}} - 1 \right),$$

$$p_{11}(E_a) = g_1 N_V(T) \exp \left(-\frac{E_a}{\lambda k T} \right), \quad (2)$$

где $g_1 = 0,5$ – степень вырождения акцепторного уровня в р-Si; $N_a(\Phi)$ – концентрация радиационно введенных акцепторных дефектов после облучения флюенсом Φ .

Если донорные и акцепторные дефекты расположены в проводящей матрице р-Si, то $\lambda = 1$, а если в области пространственного заряда кластеров, то $\lambda = 1,2$. Анализ температурных зависимостей $p_{эф}(T, \Phi)$ показал, что лучшее их описание в зависимости от T и Φ получим, если предположим наличие дефектов в области пространственного заряда кластеров с эффективным уровнем E_a/λ , которые компенсируют экранирующее действие мелких акцепторов. Здесь E_a – энергетическое положение этого же дефекта в проводящей матрице р-Si. Тогда дополнительная концентрация дырок в валентной зоне проводящей матрицы образца р-Si равна $p = p_0 + p_1$,

а дополнительная концентрация экранирующих центров в областях пространственного заряда кластеров дефектов – $P_2 = P_4 + P_3$.

На рис. 1 представлены рассчитанные согласно уравнениям (1)–(3) температурные зависимости эффективной концентрации дырок в валентной зоне р-Si после облучения образцов различными флюенсами быстрых нейтронов реактора при некоторых температурах изохронного отжига. Предполагалось, что в отсутствие статистического взаимодействия между уровнями радиационных дефектов, концентрацию носителей в проводящей матрице р-Si можно определить, если вычислить суммарную концентрацию дырок $\sum_i p_i(T, \Phi, E_i)$, которые будут поставляться в валентную зону при ионизации акцепторных и донорных уровней:

$$p(T, \Phi) = \sum_i p_i(T, \Phi, E_i) - p_{00} + N_D(\Phi), \quad (3)$$

где $i = 3$ – присутствуют в проводящей матрице один акцепторный и два донорных уровня дефектов; p_{00} – концентрация дырок в р-Si до облучения; $N_D(\Phi)$ – концентрация самого глубокого донорного уровня.

Так как образцы после облучения прошли термический отжиг, то в р-Si кластеры дефектов уже отожглись, или после отжига при 200 °С в проводящей матрице уже отсутствуют области пространственного заряда. Поэтому учитывать долю непроводящего объема не имеет смысла. Описание температурной зависимости концентрации дырок в образцах кремния после облучения и последующего изохронного отжига было выполнено согласно уравнениям (1)–(3) при $\lambda = 1$. Энергетические положения в запрещенной зоне (ЗП) кремния радиационных дефектов и их концентрации показаны в табл. 1.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Из табл. 1 видно, что уровни $E_v+0,21$ и $E_v+0,365$ наблюдаются в равной концентрации, что свидетельствует о том, что этот дефект находится в одном и том же зарядовом состоянии. Так как $E_v+0,21$ (0/+) – это положение в запрещенной зоне кремния положительно заряженной дивакансии, тогда $E_v+0,365$ и $E_v+0,20$ – это положение $V_2(0/+)$ в первой и второй конфигурациях соответственно. В процессе измерений в области температур (230...300 К) дивакансии меняют конфигурацию: экспериментальные значения концентрации дырок в валентной зоне лежат выше теоретической кривой. При повышении температуры на образце дырки, освободившись с уровня $E_v+0,21$ эВ, обладают энергией недостаточной, чтобы быть захваченными на уровень $E_v+0,365$ эВ. При малых флюенсах облучения образцов высокоомного кремния после их изохронного отжига при 200...325 °С дивакансии в процессе измерений переходят из первой во вторую конфигурацию даже при комнатной температуре (см. рис. 1,а).

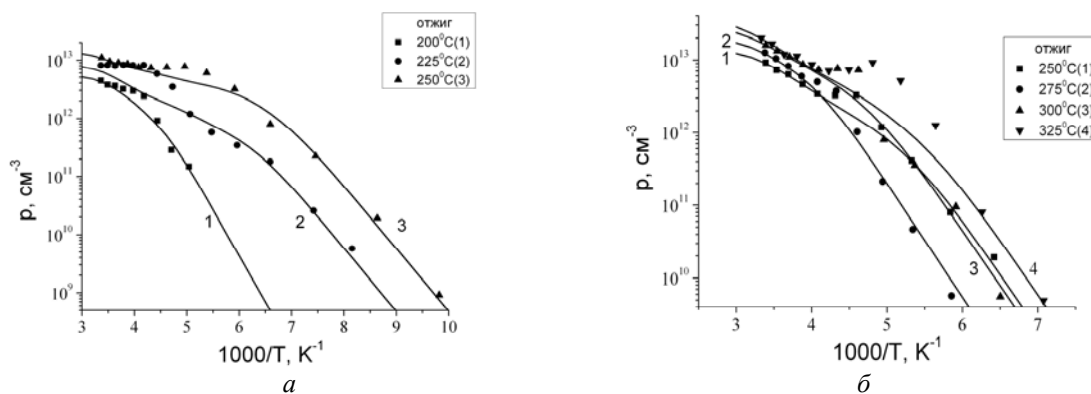


Рис. 1. Температурная зависимость концентрации носителей в p-Si ($p_{00} = 2,62 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$, $p_{00} = 7,09 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$), облучённом быстрыми нейтронами реактора ($\Phi_a = 5 \cdot 10^{12} \text{ н}^\circ \cdot \text{см}^{-2}$, $\Phi_b = 3,0 \cdot 10^{13} \text{ н}^\circ \cdot \text{см}^{-2}$) соответственно, после изохронного отжига при температурах: 1 – 200 °C; 2 – 225 °C; 3 – 250 °C (а).

1 – 250 °C; 2 – 275 °C; 3 – 300 °C; 4 – 325 °C (б). • – эксперимент; — – расчёт; отжиг – 30 мин

В работе [2] показано, что нейтральный уровень дивакансии $E_v+0,45$ эВ согласно теоретическим расчётам [1] должен отличаться на 0,07 эВ от нейтрального уровня дивакансии $E_v+0,53$ эВ в первой конфигурации. В нашем случае эта энергетическая разница равна 0,08 эВ. Нейтральные уровни дивакансии в первой и во второй конфигурационных ямах подвержены реакции перезарядки $V_2^0 \rightarrow V_2^- + V_2^+$, т. е. выступают как обычные рекомбинационные центры, которые выше комнатной температуры захватывают электроны, а ниже 292 К – дырки, так что их энергия при захвате дырок возрастает на 0,01...0,02 эВ. Медленные центры захвата электрона в области температур перезарядки $E_{0,17}$ -центра ($E_c-0,17$ эВ) были подробно исследованы в работе [7]. Показано, что скорость их введения не зависит от энергии электронного облучения, но эти дефекты отжигаются при 277 °C. Дивакансии отжигаются в том же

температурном интервале, но скорость их введения зависит от энергии электронного облучения. Медленные центры захвата в образцах Si(Fz) с Schottky барьером обладают $(0,08 \pm 0,015)$ эВ энергией активации сечения захвата электрона на акцепторный уровень с термической энергией активации 0,17 эВ. Тогда этот радиационный дефект с энтальпией ионизации (0,09 эВ) и положением $E_c-0,09$ эВ существует в запрещённой зоне кремния относительно дна зоны проводимости. В случае отжига при 277 °C в течение 4,5 ч этот дефект исчезал. Так же, как и А-центр, концентрация этого дефекта не зависит от энергии электронного облучения (в противоположность дивакансии). В работе показано, что $E_c-0,09$ эВ в кислородном кремнии и в бескислородных р-і-n-диодах имеют сравнительно малую концентрацию по отношению к А-центру.

Таблица 1

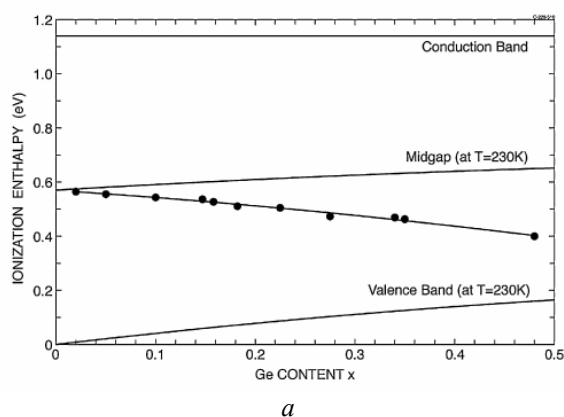
Параметры расчёта концентрации и энергетического положения уровней в запрещённой зоне кремния после облучения и изохронного отжига образцов p-Si ($p_{00} = 2,62 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$, $p_{00} = 7,09 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$)

Φ , н ⁰ /см ²	P_{00} , см ⁻³	E_v+E_d , эВ	N_a , см ⁻³	N_d , см ⁻³	T_{ann} , °C
		0,367	$5,4 \cdot 10^{12}$	$4,8 \cdot 10^{12}$	200
		0,283	$6,0 \cdot 10^{11}$	$4,8 \cdot 10^{12}$	
		0,365	$8,2 \cdot 10^{12}$	$6,0 \cdot 10^{12}$	225
$5 \cdot 10^{12}$	$2,62 \cdot 10^{11}$	0,283	$2,2 \cdot 10^{12}$	$1,6 \cdot 10^{12}$	
		0,200	$6,0 \cdot 10^{11}$	$6,0 \cdot 10^{12}$	
		0,365	$1,4 \cdot 10^{13}$	$7,0 \cdot 10^{12}$	250
		0,280	$7,0 \cdot 10^{12}$	$3,0 \cdot 10^{12}$	
		0,200	$4,0 \cdot 10^{12}$	$7,0 \cdot 10^{12}$	
		0,365	$1,4 \cdot 10^{13}$	$1,2 \cdot 10^{13}$	250
		0,280	$2,0 \cdot 10^{12}$	$3,0 \cdot 10^{12}$	
$3 \cdot 10^{13}$	$7,09 \cdot 10^{11}$	0,365	$2,0 \cdot 10^{13}$	$1,5 \cdot 10^{13}$	275
		0,283	$5,0 \cdot 10^{12}$	$3,0 \cdot 10^{13}$	
		0,365	$2,85 \cdot 10^{13}$	$2,15 \cdot 10^{13}$	300
		0,280	$7,00 \cdot 10^{12}$	$1,20 \cdot 10^{13}$	
		0,365	$3,60 \cdot 10^{13}$	$3,00 \cdot 10^{13}$	325
		0,280	$6,00 \cdot 10^{12}$	$7,00 \cdot 10^{12}$	

Вспомним, что эти дефекты с медленным захватом электронов наблюдались на образцах с барьером Schottky. В таких структурах следует учитывать наличие большого количества дефектов вблизи по-

верхности кремния (в особенности вакансий). Ввиду высокой концентрации вакансий вблизи поверхности велика вероятность радиационной вакансии образовать дивакансию, объединившись с вакансией

вблизи поверхности. Поэтому скорость введения дивакансии в образцах с барьером Schottky уже не будет зависеть от энергии электронного облучения. Тогда можно предположить, что $E_c - 0,09$ эВ является дивакансией в трижды отрицательно заряженном состоянии в первой конфигурации. А в отрицатель-



ном и дважды отрицательном зарядовом состоянии положение уровней дивакансии в кремнии во второй конфигурации равны соответственно $E_c - 0,42$ эВ и $E_c - 0,17$ эВ. При этом предполагалось, что энергия Hubbard не зависит от числа электронов, захваченных на радиационный дефект.

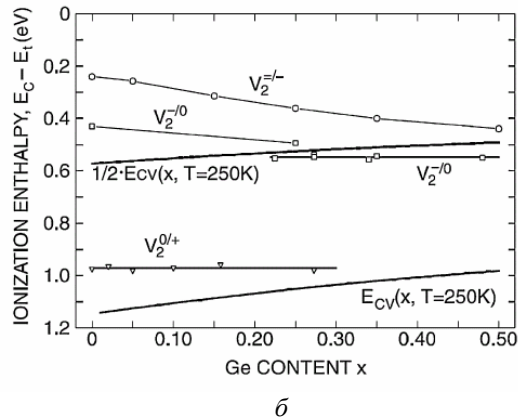


Рис. 2. Энтальпия ионизации дивакансии в различных зарядовых состояниях: в нейтральном (а) и в отрицательно заряженных и положительном (б) относительно зоны проводимости $Si_{1-x}Ge_x$ в зависимости от концентрации германия (x) в кремнии [4]

В работе [4] показано, что в $Si_{1-x}Ge_x$ ($0 < x < 0,5$) n -типа проводимости дивакансии уменьшают энергетическое положение акцепторных уровней относительно дна зоны проводимости, а в p -типе – донорные уровни относительно потолка валентной зоны за счёт повышения энергии валентной зоны. Это правило относится и к другим радиационным дефектам, например E -центрам [5]. На рис. 2 представлены результаты такого поведения акцепторных и донорных уровней дивакансии, полученные в работе [4].

Наблюдалось отсутствие непрерывности в положении $V_2(-/0)$ уровня дивакансии $\sim 0,07$ эВ, когда он пересекает середину запрещенной зоны (см. рис. 2). После пересечения середины запрещенной зоны $Si_{1-x}Ge_x$ отрицательно заряженная, так же как и положительно заряженная, дивакансия относительно дна зоны проводимости не изменяет своего положения при увеличении концентрации германия в кремнии. Всё вышесказанное позволяет определённо утверждать, что наблюдаемый разрыв $\sim 0,07$ эВ как раз и связан с конфигурационным переходом дивакансии из Q_1 - в Q_2 -конфигурацию.

Зависимость ширины E_g запрещенной зоны $Si_{1-x}Ge_x$ от концентрации германия в кремнии можно определить согласно выражениям [4]:

$$E_g(x) = E_g(Si) - 0,43 \cdot x + 0,206 \cdot x^2, \quad (x < 0,85);$$

$$E_g(Si) = 1,169 - \alpha \cdot T^2 / (\beta + T),$$

$$(\alpha = 4,9 \cdot 10^{-4} \text{ эВ/К}; \beta = 655).$$

Так, при $T = 300$ К и $x = 0,5$ $E_g = 0,9565$ эВ.

Определяя в $Si_{1-x}Ge_x$ положение уровней дивакансии относительно потолка валентной зоны при $x = 0,5$ и учитывая повышение энергии валентной зоны при переходе к германию, получаем положение уровней дивакансии в запрещенной зоне в Q_1 - и Q_2 -конфигурациях в монокристаллах Ge. Уровни различных зарядовых состояний дивакансии в

кремнии и германии в зависимости от конфигурации Q_1 или Q_2 представлены в табл. 2. Из таблицы видно, что при захвате электрона на уровень дивакансии в Si и Ge в первой конфигурации энергия уровня увеличивается на $0,165$ эВ, а во второй конфигурации – на $0,250$ эВ.

В работе [8] предложена схема уровней собственных радиационных дефектов, которая базируется не только на литературных данных. Она учитывает следующие положения: (j) радиационные дефекты создают дополнительные уровни энергии электронов в запрещенной зоне, причем собственные дефекты в кремнии амфотерны; (jj) при захвате одного или второго электрона на акцепторные уровни дивакансии или димеждоузлия положение их в запрещенной зоне кремния изменяется на величину $\Delta E_0 = (0,165 \pm 0,005)$ эВ, а в случае вакансий или междоузлий – это значение удваивается; (jjj) присоединение углерода к дивакансии повышает энергетическое положение акцепторных уровней дивакансии на величину $\Delta E_1 = 0,035$ эВ и понижает энергию донорных уровней, а присоединение кислорода к дивакансии понижает энергию акцепторных уровней и повышает энергетическое положение донорных уровней дивакансии на величину $\Delta E_2 = 0,06$ эВ.

Следует внести еще некоторые уточнения в модель модификации радиационных дефектов, таких как дивакансия и А-центры. Присоединение междоузельного атома кремния понижает энергетическое положение акцепторного уровня А-центра на $0,03$ эВ и повышает энергию донорного уровня на $0,03$ эВ. В случае присоединения димеждоузлия к А-центру энергетическое положение акцепторного уровня изменяется уже на $0,06$ эВ аналогично модификации дивакансии атомом кислорода. Углерод модифицирует А-центры, так же как и дивакансии. Исходя из того, что энергия Hubbard (E_H) в Q_1 - и в Q_2 -конфигурациях дивакансии в Si и Ge одинаковая,

можно предположить, что фоновые примеси будут модифицировать радиационные дефекты в Ge так же, как и в Si. При модификации радиационных де-

фектов фоновыми примесями положение их нейтральных уровней в запрещенной зоне не изменяется.

Таблица 2

Энергетическое положение уровней дивакансии в различном зарядовом состоянии в кремнии и в германии в зависимости от её атомной конфигурации

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

Таблица 3

Модификация радиационных дефектов фоновыми примесями в германии

$V_2(Q_1)$, эВ	$V_2(Q_2)$, эВ	PV, эВ	VO _i , эВ	VO _i I _{Ge} , эВ	I _{Ge} , эВ	I _{2Ge} , эВ	V, эВ	Зарядовое состояние
$E_v+0,25$	$E_c-0,30$	$E_c-0,37$			$E_c-0,19$	$E_c-0,25$	$E_c-0,28$	=/-
$E_v+0,085$	$E_v+0,11$	$E_v+0,10$	$E_c-0,20$	$E_c-0,23$	$E_v+0,14$	$E_v+0,25$	$E_v+0,05$	-/0
0,16	0,13	0,105	0,025	0,025	0,15*	0,10*	0,19*	ΔE эВ
0,165	0,25	0,195			0,33	0,165	0,33	E_H эВ

*Отсутствуют надёжные значения ΔE -смещений уровней. Заряд уровней I_{Ge} условно занижен на единицу.

Положение уровня E-центра $E_v+0,30$ в Ge было впервые определено Fage-Pedersen и др. в работе [9]. Дальнейшее изучение VP-центров в Ge показало, что $E_c-0,37$ эВ является вторым акцепторным уровнем E-центра и может находиться в дважды отрицательно заряженном состоянии [10, 11]. Это значит, что в кремнии должно существовать также дважды заряженное состояние E-центра в запрещённой зоне: $E_c-0,265$ эВ (=/-). Согласно [4] отрицательно заряженные E-центры с увеличением концентрации германия в кремнии понижают энергетическое положение в запрещенной зоне. Поэтому в запрещённой зоне относительно E_c -зоны энергия акцепторных уровней E-центров будет понижена на 0,105 эВ в германии относительно E_c -зоны в кремнии. Появление в Ge, облучённом 2 МэВ электронами, спустя некоторое время после облучения и исчезновение спустя десять дней уровней $E_c-0,13$ эВ и $E_c-0,19$ эВ можно объяснить освобождением межузельного атома Ge (I_{Ge}) из ловушки и частичным захватом на атом фосфора и уходом на стоки в дальнейшем. В кремнии наблюдалось, что легирующая примесь (фосфор) около A-центра повышает энергию VO_iP на 0,17-0,105=0,065 эВ [12]. Поэтому уровень $E_c-0,19$ эВ (3-/2-) принадлежит в германии межузельному атому Ge (I_{Ge}), а уровень $E_c-0,13$ эВ (=/-) – I_{Ge}P-дефекту. Близкое значение энергии в ЗП германия может иметь димеждоузлие I_{2Ge}. Возможно, что при комнатной температуре распадается пара Френкеля и рождаются вакансия и межузельный атом германия в равной концентрации. Вакансия возле межузельного атома кислорода будет иметь уровень $E_c-0,13$ эВ (3-/2-), а межузельный атом германия – $E_c-0,19$ эВ (3-/2-).

Уровень дивакансии $V_2(-/0)$: $E(V_2) = E_v+0,085$ эВ в германии определяет предельное положение уровня Ферми при облучении быстрыми нейтронами

реакторного спектра: $E_f = E_v+0,125$ эВ и концентрацию дырок в валентной зоне: $P = 2,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Тогда концентрацию V_2 в кластерах легко определить:

$$N(V_2) = P \left[2 \cdot \exp\left(\frac{E_f - E(V_2)}{kT}\right) + 1 \right],$$

при $T=300$ К $N(V_2)=2,0 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Такая высокая концентрация дивакансий в кластерах создаёт вблизи валентной зоны примесную зону шириной (ΔE) [13]:

$$\Delta E = \sqrt{8 \ln 2} \cdot B, \quad B = \frac{e^2 (Na + Nd)^{2/3}}{\chi \chi_0 (Na - Nd)^{1/3}},$$

где e – заряд электрона; Na , Nd – концентрации акцепторов и доноров; $\chi=70$; $\chi_0=8,8510^{-12}$ ф/м. При $Na = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ $\Delta E = 0,08$ эВ, что согласуется с экспериментальным значением концентрации дырок в валентной зоне n-облучённого Ge: $P = 2,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

$$P = Nv \cdot \exp\left(\frac{E_f - \Delta E / 2}{kT}\right).$$

Плотность состояний в валентной зоне

$$Nv(T) = 4,82 \cdot 10^{15} T^{3/2} (m_{dp} / m_0)^{3/2},$$

где $m_{dp} / m_0 = 0,39$, $Nv(300 \text{ К}) = 6,04 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

ВЫВОДЫ

Приведены значения энергетических уровней дивакансии в кремнии и германии в разных конфигурациях. Показано, что у радиационных дефектов в германии отсутствуют донорные уровни, а Hubbard энергия у дефектов такая же, как и в кремнии. Уровень дивакансии $V_2(-/0)$ в Q₁-конфигурации $E_v + 0,085$ эВ определяет концентрацию дырок $2,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ в валентной зоне p-Ge и положение уровня Ферми $E_v+0,125$ эВ в кластерах дефектов,

созданных быстрыми нейтронами в германии. Концентрация дефектов $\sim 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ в кластерах образует примесную зону около валентной зоны шириной 0,08 эВ.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. С.С. Моливер. Метод открытой оболочки для электронной структуры дивакансии кремния // *ФТТ*. 1999, т. 44, в. 3, с. 404-410.
2. А.П. Долголенко. Электронные уровни конфигураций дивакансий в кремнии // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2012, №5(81), с.13-20.
3. J.H. Crawford, Jr., and J.W. Cleland. Nature of Bombardment and Energy Levels in Semiconductors // *J. of Appl. Phys.* 1959, v. 30, N 8, p. 1204-1213.
4. A. Nylandsted Larsen, A. Bro Hansen, A. Mesli. Irradiation-induced defects in SiGe // *Mater. Sci. Eng. B*. 2008, v. 154-155, p. 85-89.
5. Arne Nylandsted Larsen, Abdelmadjid Mesli. The hidden secrets of the E-center in Si and Ge // *Physica B*. 2007, v. 401-402, p. 85-90.
6. A.P. Dolgolenko, I.I. Fishchuk. 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, v. 67, N 8, p. 407.
7. 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.
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. J. FagePedersen, A.N. Larsen, A. Mesli. Irradiation-induced defects in studied by transient spectroscopies // *Phys. Rev. B*. 2000, v. 62, N 15, p. 10116-10125.
10. V.P. Markevich, A.R. Peaker, V.V. Litvinov, V.V. Emtsev, L.I. Murin. // *J. Appl. Phys.* 2004, v. 95, p. 4078.
11. V.P. Markevich, I.D. Hawkins, A.R. Peaker, K.V. Emtsev, V.V. Emtsev, V.V. Litvinov, L.I. Murin, L. Dobaczewski // *Phys. Rev.* 2004, v. 70, p. 235213.
12. G.E. Jellison, Jr. Transient capacitance studies of an electron trap at $E_c - E_T = 0.105 \text{ eV}$ in phosphorus doped silicon // *J. Appl. Phys.* 1982, v. 53, N 8, p. 5715-5719.
13. Я. Партыка, П.В. Жуковский, П. Венгерэк, А. Родзик, Ю.В. Сидоренко, Ю.А. Шостак. Температурная зависимость ширины зоны глубоких уровней в сильнодефектном кремнии // *ФТП*. 2002, т. 36, №12, с. 141.

Статья поступила в редакцию 22.03.2013 г.

ЕЛЕКТРОННІ РІВНІ КОНФІГУРАЦІЙ ДИВАКАНСІЇ В ГЕРМАНІЇ

А.П. Долголенко

Досліджені високоомні зразки p-Si ($p_0 = (1,63 \dots 7,09) \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$), вирощені методом безтигельної зонної плавки, після опромінення швидкими нейтронами реактора при 320 К до і після ізохронного відпалу. Визначено у германії енергетичні рівні дивакансії в трьох зарядових станах у залежності від її конфігурації в кремнії і приведено значення енергетичних рівнів дивакансії та E-центра. Показано, що в радіаційних дефектах у Ge немає донорних рівнів, а енергія Hubbard у дефектів така ж, як і в Si. Рівень дивакансії $V_2(-/0)$ у Q_1 -конфігурації $E_v + 0,085 \text{ eV}$ визначає концентрацію дірок у валентній зоні p-Ge $2,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ і положення рівня Фермі $E_v + 0,125 \text{ eV}$ у кластерах дефектів, створених швидкими нейтронами в Ge. Концентрація дефектів $\sim 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ у кластерах утворює домішкову зону біля валентної зони шириною 0,08 эВ.

ELECTRONIC CONFIGURATIONS OF THE LEVELS OF DIVACANCIES IN GERMANIUM

A.P. Dolgolenko

High-resistance samples p-Si ($p_0 = (1.63 \dots 7.09) \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$), grown by the floating zone melting after irradiation with fast neutron reactor at 320 K after isochronal annealing were studied. The energy levels in germanium of a divacancy in three charge states, depending on its configuration in silicon are determined. The values of the energy levels of divacancies and E-center are resulted. Shows that radiation defects in Ge no donor levels and Hubbard energy have the same defects as in Si. Divacancy (V_2) level (-/0) $E_v + 0.085 \text{ eV}$ in Q_1 -configuration determines the concentration of holes in the valence band p-Ge $2.2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ and the position of the Fermi level $E_v + 0.125 \text{ eV}$ in clusters of defects produced by fast neutron in Ge. The concentration of defects $\sim 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ in clusters form the impurity zone near the valence band of width equal 0.08 eV.