

## КОНФИГУРАЦИОННАЯ ПЕРЕСТРОЙКА ДИВАКАНСИИ: ЭЛЕКТРОННЫЕ ОБОБЩЕННЫЕ УРОВНИ В ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЕ КРЕМНИЯ

*А.П. Долголенко*

*Институт ядерных исследований НАН Украины,*

*Киев, Украина*

*E-mail: odolgolenko@kinr.kiev.ua*

Описана температурная зависимость концентрации носителей в кремнии, связанная с перезарядкой дважды отрицательной и положительно заряженной дивакансии в процессе ее конфигурационной перестройки из одной конфигурации с большей дисторсии в меньшую дисторсию и обратно. Показано, что экспериментальное наблюдение обобщенных уровней  $E_c-0,23$  и  $E_v+0,283$  эВ дивакансии возможно только в процессе их конфигурационной перестройки. Установлено, что концентрация  $V_2^{2-/}$  с экспериментально наблюдаемым уровнем  $E_c-0,23$  эВ определяется не только видом ядерного излучения, но и зависит от введения точечных дефектов межузельного типа. Представлена в зависимости от температуры возможная конфигурационная перестройка дивакансий в  $\gamma$ -облученном n-Si. Математически описана температурная зависимость концентрации электронов в зоне проводимости n-типа кремния. Определены концентрация и зарядовое состояние обобщенного уровня  $E_c-0,11$  эВ дивакансии.

### ВВЕДЕНИЕ

Дивакансия является одним из основных дефектов, созданных облучением ядерными частицами, благодаря своим фундаментальным характеристикам [1, 2] наиболее интенсивно изучалась в кремнии как экспериментально, так и теоретически. Самая простая модель для дивакансии предполагает  $D_{3d}$ -симметрию, которая при низких ( $\leq 20$  K) температурах релаксирует в  $C_{2h}$ -симметрию, после того как вне плоскости Si атомы располагаются парами. Ненарушенная конфигурация  $V_2$  имеет  $D_{3d}$  точечно-групповую симметрию с высокосимметричной осью вдоль четырех эквивалентных  $\langle 111 \rangle$  направлений. Переориентация оси вакансия–вакансия в  $V_2$  возможна путем движения электрона (переключение связи) между тремя идентичными Jahn-Teller (JT) дисторсиями, имеющими энергетический барьер между любыми из двух конфигурациями около 0,06 эВ [1, 2]. В работе [3] определено, что при повышенных температурах для  $V_2^+$  при 110 K и для  $V_2^-$  при 70 K скорость электронных прыжков между членами триплетных эквивалентных JT направлений дисторсии такая высокая, что дисторсия каждой конфигурации является динамично «усредненной», а эффективная симметрия увеличивается до  $D_{3d}$ . Обосновав теоретически, авторы [4] высказали принципиальную возможность иметь оба ( $V_2^{2-}$  ( $D_{3d}$ ) и  $V_2^{2-}$  ( $C_{2h}$ )) дефектных состояния в n-Si, облученном энергетическими частицами. При этом фононами ассистированные переходы могут наблюдаться между этими двумя состояниями. Причем  $V_2^{2-}$  ( $C_{2h}$ )-состояние, вероятно, будет более низким по энергии, чем  $V_2^{2-}$  ( $D_{3d}$ )-состояние. Тем не менее, в работе [5] высказано сомнение, что при высокой температуре, где переориентационное движение становится заметным,  $C_{2h}$ -симметрия может сохраняться.

При исследованиях EPR-методом были определены только однократно положительно и отрицательно заряженные дивакансии, а существование  $V_2^{2-/}$  было постулировано. Окончательно дивакан-

сии было приписано положение в запрещенной зоне кремния с энергией  $E_c-0,23$  эВ [6], хотя экспериментально определялись значения от  $E_c-0,22$  [7] до  $E_c-0,261$  эВ [8]. Наблюдалось отклонение от 1:1 отношения концентраций между  $V_2^{-0}$  и  $V_2^{2-/}$ , которое наблюдалось при  $\gamma$ -облучении [7], а в случае облучения ионами различной массы [9] или облучения адронами различной энергией [10] оно составляло 1:(2-4) – в сторону уменьшения заселенности концентрации уровня дивакансии  $V_2^{2-/}$ .

Метод молекулярных орбиталей подтвердил результаты метода функционала плотности и представление о двухъямном потенциале дивакансии в нейтральном и заряженном состояниях в кремнии. Разность энергий между абсолютным и метастабильным минимумами адиабатической энергии нейтральной дивакансии была определена значением 0,07 эВ [11]. Это позволило в работе [12] обосновать энергетические уровни дивакансии во второй конфигурации с меньшей Jahn-Teller дисторсией. Рассмотрены эксперименты в кремнии и германии, 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 [13].

Так как третьей конфигурации  $V_2$  в кремнии не существует, то экспериментально определяемое положение  $E_c-0,23$  эВ в запрещенной зоне возможно связано с различной концентрацией конфигураций дивакансий [13]. Хотя  $E_c-0,261$  и  $E_c-0,17$  эВ-уровни энергетически отстоят достаточно далеко при температурной их перезарядке,  $E_c-0,23$  эВ-уровень экспериментально наблюдается [14]. Малую заселенность дважды отрицательно заряженной дивакансии  $E_c-0,23$  эВ в кремнии объясняли как деформацией решетки Si [9], так и межцентровыми переходами [15].

Цель работы – описать температурную зависимость концентрации носителей, связанную с пере-

рядкой дважды отрицательно и положительно заряженных дивакансий в процессе конфигурационного перехода из одной конфигурации в другую и наоборот.

## РЕЗУЛЬТАТЫ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

На рис. 1 показаны температурные зависимости концентрации дырок в валентной зоне p-Si ( $p_0 = 6,4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ) при наличии донорных уровней дивакансий в предположении их конфигурационных переходов из первой во вторую конфигурацию. На

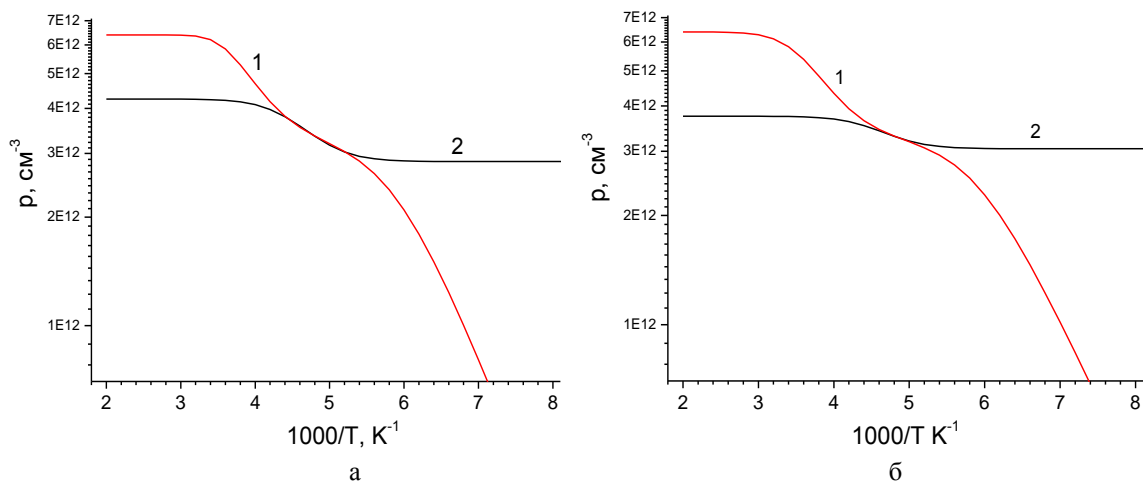


Рис. 1. Температурные зависимости концентрации дырок в p-Si ( $p_0 = 6,4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ) при наличии донорных уровней: 1 –  $E_v + 0,365$  и  $E_v + 0,20$  эВ дивакансии в первой и второй конфигурации; 2 – обобщенного  $E_v + 0,283$  эВ-уровня дивакансии. Вероятность конфигурационного перехода ( $\Delta p_d / N_d$ ) дивакансии из первой конфигурации во вторую: а – 1; б – 0,5

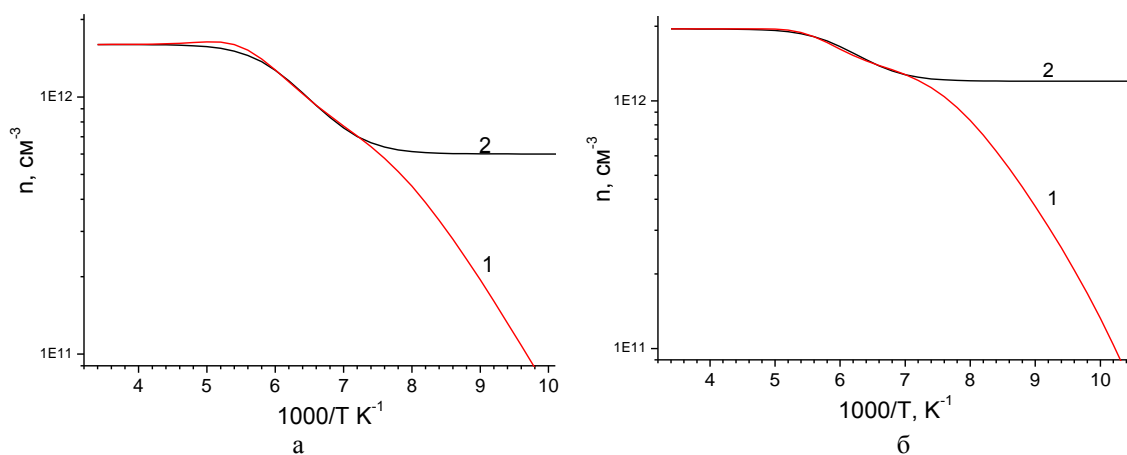


Рис. 2. Температурные зависимости концентрации электронов в n-Si ( $n_0 = 2,1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ) при наличии акцепторных уровней: 1 –  $E_c - 0,26$  и  $E_c - 0,17$  эВ дивакансии в первой и во второй конфигурациях; 2 – обобщенного  $E_c - 0,23$  эВ-уровня дивакансии. Вероятность конфигурационного перехода ( $\Delta n_d / N_d$ ) дивакансии из первой конфигурации во вторую: а – 1; б – 0,5

## СТАТИСТИКА ЗАПОЛНЕНИЯ АКЦЕПТОРНЫХ И ДОНОРНЫХ СОСТОЯНИЙ ДИВАКАНСИИ В n- И p-ТИПАХ КРЕМНИЯ

Рассмотрим полупроводник p-Si, легированный атомами бора с некомпенсированной концентрацией  $N_a$ , в области температур от комнатной до температуры жидкого азота. Пусть имеются точечные дефекты донорного типа с концентрацией  $N_d < N_a$ . Бу-

дем считать p-Si невырожденным ( $N_a < 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ). Тогда при повышении температуры образца p-Si от 77 К будем иметь некоторую концентрацию дырок в валентной зоне за счет теплового возбуждения дырок с уровня  $E_d$  в проводящей матрице  $p_1(T)$ . Из решения квадратичного уравнения, которое вытекает из условия электронейтральности, получим температурную зависимость концентрации дырок в образце [12]:

рис. 2 и 3 представлены температурные зависимости концентрации электронов в зоне проводимости n-Si ( $n_0 = 2,1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$  и  $n_0 = 1,32 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ) в присутствии акцепторных уровней дивакансии при условии конфигурационной ее перестройки из первой конфигурации во вторую с меньшей дисторсией и обратно. В табл. 1–3 приведены параметры расчета концентрации свободных носителей в соответствующих зонах в зависимости от вероятности конфигурационных переходов дивакансий из первой конфигурации во вторую.

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

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

где  $g = 2$  – фактор вырождения донорного уровня в p-Si;  $N_d$  – концентрация донорных дефектов;  $p_{11}(E_d)$  – концентрация дырок в валентной зоне p-Si, когда уровень Ферми совпадает с уровнем  $E_d$  в проводящей матрице.

На рис. 1 были показаны рассчитанные, согласно уравнениям (1)–(2), температурные зависимости концентрации дырок в валентной зоне p-Si. Параметры расчета радиационных дефектов приведены в табл. 1.

Предполагалось, что в случае отсутствия статистического взаимодействия между уровнями радиационных дефектов, концентрацию носителей в проводящей матрице p-Si можно определить, если вычислить суммарную концентрацию дырок  $\sum_i p_i(T, E_i)$ , которые будут поставляться в валентную зону при ионизации донорных уровней:

$$p(T) = \sum_i p_i(T, E_i) - p_{00} + N_D, \quad (2)$$

где  $i = 2$  – присутствуют в проводящей матрице два донорных уровня дефектов;  $p_{00}$  – начальная концентрация дырок в p-Si;  $N_D$  – концентрация самого глубокого донорного уровня.

В случае n-Si, если заменить доноры на акцепторы, а акцепторы на доноры, аналогично уравнениям (1) и (2) получим концентрацию электронов в зоне проводимости n-Si при повышении температуры образца от 77 К.

## ОБСУЖДЕНИЕ МОДЕЛЬНЫХ РАСЧЕТОВ

Независимо от методов исследования радиационных дефектов в кремнии доказано, что  $E_c-0,23$  эВ-уровень принадлежит дивакансии ( $V_2^{2-}$ ), но по отношению к  $V_2^{1-}$  его концентрация зависит от энергии облучения ионами [9] или видов ( $\gamma$ ,  $n^0$ ) ядерных частиц [10]. Теоретическое рассмотрение убедительно подтвердило представление о двухъямном потенциале дивакансии [11], что позволило определить энергетические уровни в запрещенной зоне кремния [12] в зависимости от конфигурации дивакансии с большей и меньшей Jahn-Teller дисторсиями. В p-Si экспериментально наблюдались конфигурационный переход ( $V_2^+$ ) из большей дисторсии в меньшую при равенстве концентрации уровней дивакансии  $E_v+0,365$  и  $E_v+0,20$  эВ и появление между ними уровня  $E_v+0,283$  эВ в отсутствие равенства [12]. Но, как можно показать на основе уравнений (1) и (2), эти уровни далеко разнесены в запрещенной зоне кремния, и появление этого уровня невозможно.

Предположим, что дивакансия может переходить из одной конфигурации в другую, а именно, в процессе понижения температуры p-Si и перезарядки уровня  $E_v+0,365$  эВ дивакансия изменяет свою конфигурацию после захвата дырки так, что при этом увеличивается концентрация дивакансий с уровнем

$E_v+0,20$  эВ. Математически это можно описать, как уменьшение концентрации доноров в первой конфигурации дивакансии и их добавление к концентрации доноров во второй конфигурации дивакансии. Действительно, тогда появляется  $E_v+0,283$  эВ-уровень дивакансии как совместная перезарядка этих уровней с различной дисторсией (см. рис. 1,а). Кроме того, при этом наблюдаются и донорные уровни  $E_v+0,365$  и  $E_v+0,20$  эВ дивакансии, которые уже изменили свое зарядовое состояние.

В табл. 1 представлены параметры, которые использованы при вычислении температурных зависимостей концентрации дырок, согласно уравнениям (1), (2) в валентной зоне p-Si:  $N_a$  – концентрация мелких акцепторов (бор);  $N_d$  – концентрация и  $E_d$  – энергия донорных уровней дивакансии;  $\Delta p_d$  – концентрация конвертирующих дивакансий.

В высокоомном n-Si, выращенном методом бесстигельной зонной плавки, наблюдаются дивакансии с уровнем  $E_c-0,425$  эВ в отрицательно заряженном состоянии с концентрацией в два раза выше дважды отрицательно заряженного состояния с  $E_c-0,23$  эВ-уровнем. Следует учитывать, что дивакансия – это дефект с двухъямным потенциалом и энергетическими уровнями в запрещенной зоне кремния в зависимости от ее конфигурации. Согласно табл. 2 в работе [13]  $E_c-0,23$  эВ-уровня дивакансии в кремнии не существует. Уровни  $E_c-0,261$  и  $E_c-0,17$  эВ дивакансии ( $V_2^{2-}$ ) с большей и меньшей дисторсиями далеко разнесены в запрещенной зоне n-Si, и появление уровня  $E_c-0,23$  эВ невозможно. Но можно предположить, что дивакансия может в процессе измерений переходить из первой конфигурации во вторую. Математически это можно описать, как уменьшение концентрации акцепторов дивакансии в первой конфигурации и добавление ее к концентрации во второй конфигурации. Тогда действительно появляется уровень  $E_c-0,23$  эВ (см. рис. 2,а).

В табл. 2 приведены параметры, которые были использованы при вычислении температурных зависимостей концентрации электронов в зоне проводимости n-Si с помощью уравнений, аналогичных уравнениям (1) и (2):  $N_d$  – концентрация мелких доноров (фосфора);  $N_a$  – концентрация и  $E_a$  – энергия акцепторных уровней дивакансии;  $\Delta n_a$  – концентрация конвертирующих дивакансий.

При температурах, при которых обычно проводятся измерения, время переориентации дивакансии [1, 2] значительно меньше времени перезарядки дефекта. Поэтому при понижении температуры  $V_2^{2-}$  в первой конфигурации, еще не захватив электрон на уровень  $E_c-0,261$  эВ, уже конвертировала во вторую конфигурацию, увеличив концентрацию дивакансий с уровнем  $E_c-0,17$  эВ. Поэтому в n-Si экспериментально уровень  $E_c-0,261$  эВ не наблюдается. Можно математически это учесть путем уменьшения концентрации доноров (см. рис. 2,а,б).

Экспериментально наблюдалось, что в случае облучения кремния ионами с различными массами уменьшается концентрация дефектов с  $E_c-0,23$  эВ-уровнем [9]. Можно предположить, что введение большей концентрации дефектов межузельного типа создает дополнительную деформацию решетки кремния и, таким образом, уменьшается концентрация

ция дивакансий, которые могут конвертировать из первой конфигурации ( $C_{2h}$ ) во вторую ( $D_{3d}$ ). Математически это достигается уменьшением концен-

трации дивакансий, перешедших во вторую конфигурацию с меньшей дисторсией Яна-Теллера (см. рис. 1,б и 2,б).

Таблица 1

Параметры расчета концентрации дырок в p-Si ( $p_0 = 6,4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ) при наличии донорных уровней дивакансии в первой и второй конфигурациях в отношении 0,5 и 1,0 и обобщенного уровня дивакансии

$N_a, \text{ см}^{-3}$	$N_d, \text{ см}^{-3}$	$\Delta p_d, \text{ см}^{-3}$	$E_v + E_d, \text{ эВ}$	Отношение концентраций
$6,4 \cdot 10^{12}$	$3,2 \cdot 10^{12}$	$-3,2 \cdot 10^{12}$	0,365	$N_d(0,365)/N_d(0,2)$
$3,2 \cdot 10^{12}$	$3,2 \cdot 10^{12}$	$+3,2 \cdot 10^{12}$	0,20	=0,5
$4,25 \cdot 10^{12}$	$1,4 \cdot 10^{12}$	–	0,283	$\Delta p_d/N_d=1,0$
$6,4 \cdot 10^{12}$	$3,2 \cdot 10^{12}$	$-1,610^{12}$	0,365	$N_d(0,365)/N_d(0,2)$
$3,2 \cdot 10^{12}$	$1,6 \cdot 10^{12}$	$+1,610^{12}$	0,20	=1,0
$3,75 \cdot 10^{12}$	$7 \cdot 10^{11}$	–	0,283	$\Delta p_d/N_d=0,5$

Таблица 2

Параметры расчета концентрации электронов в зоне проводимости в n-Si ( $n_0 = 2,1 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ) при наличии акцепторных уровней дивакансии в первой и во второй конфигурациях в отношении 2,0 и обобщенного уровня дивакансии

$N_d, \text{ см}^{-3}$	$N_a, \text{ см}^{-3}$	$\Delta n_a, \text{ см}^{-3}$	$\Delta n_d, \text{ см}^{-3}$	$E_c - E_a, \text{ эВ}$	Отношение концентраций
$2,1 \cdot 10^{12}$	$1,4 \cdot 10^{12}$	$-1,4 \cdot 10^{12}$	$-5 \cdot 10^{11}$	0,26	$N_a(0,26)/N_a(0,17)$
$7 \cdot 10^{11}$	$7 \cdot 10^{11}$	$+1,4 \cdot 10^{12}$	–	0,17	=2
$1,6 \cdot 10^{12}$	$1,0 \cdot 10^{12}$	–	–	0,23	$\Delta n_d/N_a=1,0$
$2,1 \cdot 10^{12}$	$1,4 \cdot 10^{12}$	$-7 \cdot 10^{11}$	$-1,5 \cdot 10^{11}$	0,26	$N_a(0,26)/N_a(0,17)$
$1,5 \cdot 10^{12}$	$7 \cdot 10^{11}$	$+7 \cdot 10^{11}$	–	0,17	=2
$1,95 \cdot 10^{12}$	$7,5 \cdot 10^{11}$	–	–	0,23	$\Delta n_d/N_a=0,5$

При  $\gamma$ -облучении n-Si [7] наблюдались уровни дивакансии в отрицательном и дважды отрицательном состояниях  $E_c-0,22$  эВ почти в равных концентрациях и уровень  $E_c-0,11$  эВ без его определения зарядового состояния. Предположим, что при  $\gamma$ -облучении кремния образуются дивакансии в нейтральном состоянии с симметрией  $D_{3d}$  и отсутствуют дефекты межузельного типа. При понижении температуры образца n-Si происходит перезарядка нейтрального уровня дивакансий, а захват электрона понижает симметрию  $V_2^{-/0}$  до  $C_{2h}$ . Так как перезарядка происходит при высокой температуре, то образуется двигательное усредненное состояние дивакансии с эффективной симметрией  $D_{3d}$  [9], обусловленное высокой скоростью переброски связей между тремя эквивалентными направлениями Яна-Теллера дисторсии. При дальнейшем понижении температуры образца n-Si при захвате электрона на орбиталь  $e_u$ -уровня дивакансии образуется  $V_2(D_{3d})$  и на орбиталь  $a_{1g}$  имеем  $V_2(C_{2h})$ . Одновременный захват электрона на уровень  $E_c-0,26$  эВ  $V_2^{2-/}$  с большей дисторсией и на уровень  $E_c-0,17$  эВ с меньшей дисторсией образует обобщенный  $E_c-0,23$  эВ-уровень дивакансии, обусловленный высокой скоростью переброски связей между конфигурациями  $V_2(D_{3d})$  и  $V_2(C_{2h})$ . Вероятность переброски связей определяет концентрацию обобщенного  $E_c-0,23$  эВ-уровня  $V_2^{2-/}$ .

При понижении температуры n-Si ниже 100 К и захвате третьего электрона на орбиталь  $a_{1g}$   $E_c-0,09$  эВ-уровня будут экспериментально наблюдаться трижды заряженные дивакансии с симметрией  $V_2(C_{2h})$  с большей дисторсией. Можно предположить, что при захвате третьего электрона на уровень

$E_c-0,17$  эВ дивакансии с  $D_{3d}$ -симметрией её энергия повышается, и она конвертирует в состояние с симметрией  $C_{2h}$  и энергией  $E_c-0,09$  эВ.

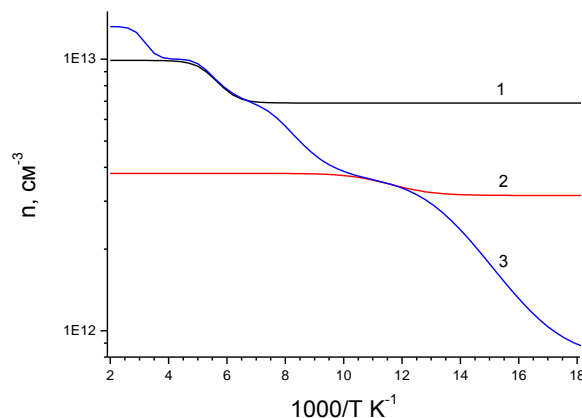


Рис. 3. Температурные зависимости концентрации электронов в n-Si ( $n_0 = 1,32 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ), облученном  $\gamma$ -квантами, при условии конфигурационных переходов акцепторных уровней дивакансии из первой во вторую конфигурацию и наоборот в отношении  $\sim 1:1$  (3). Определение концентрации обобщенных уровней дивакансии:  
1 –  $E_c-0,23$  эВ и 2 –  $E_c-0,11$  эВ

При температуре 100 К вероятность переключения электронных связей еще достаточно высокая, так что образуется динамично усредненное состояние с виртуальным захватом третьего электрона через зону проводимости с равной вероятностью на уровни этих конфигураций дивакансии. Тогда обра-

зуется обобщенный уровень  $E_c-0,11$  эВ дивакансии  $V_2^{3-/2-}$ , который наблюдается экспериментально [7].

Конфигурационный переход дивакансии из большей в меньшую дисторсию и обратно в кремнии был математически описан с помощью вытекающего из условия электронейтральности квадратичного уравнения (1), как уменьшение начальной концентрации  $E_c-0,26$  или  $E_c-0,17$  эВ-уровня дивакансии на определенную величину с той же самой энергией активации (рис. 3).

Расчет температурной зависимости концентрации электронов в зоне проводимости n-Si проводился на основе уравнений, аналогичных уравнениям (1) и (2).

В табл. 3 представлены параметры, которые использованы при вычислении температурных зависимостей концентрации электронов в зоне проводимости n-Si:  $N_d$  – концентрация мелких доноров (фосфор);  $N_a$  – концентрация и  $E_a$  – энергия акцепторных уровней дивакансии;  $\Delta n_a$  – концентрация конвертирующих дивакансий.

Таблица 3

Параметры расчета концентрации электронов в зоне проводимости облученного  $\gamma$ -квантами n-Si ( $n_0 = 1,32 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ) при условии конфигурационных переходов акцепторных уровней дивакансии из первой во вторую конфигурацию и наоборот в отношении  $\sim 1:1$  и определение концентрации обобщенных уровней дивакансии:  $E_c-0,23$  и  $E_c-0,11$  эВ

$N_d, \text{ см}^{-3}$	$N_a, \text{ см}^{-3}$	$\Delta n_a, \text{ см}^{-3}$	$E_c-E_a, \text{ эВ}$	Отношение концентраций
$1,32 \cdot 10^{13}$	$3,2 \cdot 10^{12}$	–	0,42	$N_a(0,42)/N_a(0,26)=1,0$
$1,0 \cdot 10^{13}$	$3,2 \cdot 10^{12}$	$-3,2 \cdot 10^{12}$	0,26	$N_a(0,26)/N_a(0,17)=1,0$
$6,8 \cdot 10^{12}$	$3,2 \cdot 10^{12}$	$-2,8 \cdot 10^{12}$	0,17	$N_a(0,17)/N_a(0,09)=1,14$
$3,6 \cdot 10^{12}$	$2,8 \cdot 10^{12}$	–	0,09	$\Delta n_a/N_a(0,26)=1,0$
$9,9 \cdot 10^{12}$	$3,0 \cdot 10^{12}$	–	0,23	$\Delta n_a/N_a(0,17)=0,875$
$3,8 \cdot 10^{12}$	$6,5 \cdot 10^{11}$	–	0,11	$N_a(0,42)/N_a(0,23)=1,07$ $N_a(0,42)/N_a(0,09)=1,14$

## ВЫВОДЫ

Проведены вычисления вероятностей появления уровней  $E_c-0,23$ ,  $E_c-0,11$  и  $E_v+0,283$  эВ в облученных образцах кремния n- и p-типов соответственно. Показано, что появление этих обобщенных уровней связано с конфигурационными переходами дивакансии из состояния с большей дисторсией в меньшую дисторсию и наоборот. Введение дефектов межузельного типа, создающих дополнительную деформацию решетки кремния, является причиной уменьшения вероятности конфигурационной перестройки дивакансий и понижения экспериментально наблюдаемых концентраций дважды и трижды отрицательно и положительно заряженных обобщенных уровней дивакансии. Математически описана температурная зависимость концентрации электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне кремния. В зависимости от температуры измерения представлена возможная конфигурационная перестройка дивакансий в  $\gamma$ -облученном n-Si. Определена концентрация и зарядовое состояние обобщенных уровней дивакансии.

## 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. *Ibid*, p. 555-560.
3. 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.
4. U. Lindelfelt, Wang Yong-Liang. First- and second-nearest-neighbor divacancies in silicon: Origin

and ordering of gap levels // *Phys. Rev. B.* 1988-II, v. 38, N 6, p. 4107-4112.

5. Gyeong S. Hwang and William A. Goddard III. Diffusion and dissociation of neutral divacancies in crystalline silicon // *Phys. Rev.* 2002, v. 65, p. 233205-1-3.

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

7. M. Moll, H. Feick, E. Fretwurst, G. Lindstrom, C. Schutze. Comparison of defects produced by fast neutrons and  $^{60}\text{Co}$ -gammas in high-resistivity silicon detectors using deep-level transient spectroscopy // *Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A.* 1997, v. 388, N 3, p. 335-339.

8. 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.

9. 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.

10. M. Moll, E. Fretwurst, M. Kuhnke, G. Lindstrom. Relation between microscopic defects and macroscopic changes in silicon detector properties after hadron irradiation // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B.* 2002, v. 186, p. 100-110.

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

12. 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.

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

14. E. Simoen, J. Vanhellefont, and C. Claeys. Effective generation-recombination parameters in high-energy proton irradiated silicon diodes // *Appl. Phys. Lett.* 1996, v. 69(19), p. 2858-2860.

15. S.J. Watts, J. Matheson, I.H. Hopkins-Bond, A. Holmes-Siedle, A. Mohammadzadeh, and R. Pace. A new model for generation-recombination in silicon depletion region after neutron irradiation // *IEEE Trans on Nucl. Sci.* 1996, v. 43, N 6, p. 2587-2594.

*Статья поступила в редакцию 30.03.2015 г.*

## **КОНФІГУРАЦІЙНА ПЕРЕБУДОВА ДИВАКАНСІЙ: ЕЛЕКТРОННІ УЗАГАНЕНІ РІВНІ В ЗАБОРОНЕНІЙ ЗОНІ КРЕМНІЮ**

*О.П. Долголенко*

Описана температурна залежність концентрації електронів у n-Si, яка пов'язана з перезарядженням двічі негативно зарядженої дивакансії в процесі конфігураційної перебудови з однієї конфігурації з більшої дисторсії в меншу дисторсію і навпаки. Доведено, що експериментальне спостереження так узагальнених рівнів  $E_c-0,23$  і  $E_v+0,283$  eV дивакансії можливо тільки в процесі її конфігураційної перебудови. Показано, що концентрація  $V_2^{2-}$  з експериментально спостережуваним рівнем  $E_c-0,23$  eV визначається не тільки видом ядерного випромінювання, але і залежить від введення точкових дефектів міжзельного типу. Представлена в залежності від температури можлива конфігураційна перебудова дивакансій в  $\gamma$ -опроміненому n-Si. Математично описано температурна залежність концентрації електронів у зоні провідності n-типу кремнію. Визначена концентрація і зарядовий стан узагальненого рівня  $E_c-0,11$  eV дивакансії.

## **THE CONFIGURATION REALIGNMENT OF DIVACANCIES: ELECTRONIC GENERALIZED LEVELS IN THE FORBIDDEN GAP OF SILICON**

*A.P. Dolgolenko*

The temperature dependence of the electron concentration in n-Si associated with recharging a doubly negatively charged divacancy in the process configuration adjustment from one configuration with greater distortion in the smaller and vice versa was described. It is proved that the experimental observation of generalized  $E_c-0.23$  and  $E_v+0.283$  eV levels of divacancy is possible only in the process of its configuration adjustment. It is shown that the concentration  $V_2^{2-}$  with experimentally observed level of the  $E_c-0.23$  eV is determined not only by nuclear radiation, but also depends on the introduction of point defects interstitial type. Depending on temperature possible configuration rebuilding of divacancy in the irradiated n-Si was presented. Mathematically the temperature dependence of the electron concentration in the conduction band of n-type silicon was described. The concentration and charge state of the generalized level  $E_c-0.11$  eV of divacancy was defined.