

ФИЗИКА РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ И ЯВЛЕНИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

УДК 621.315.592.3:546.28:539.12.04

КИНЕТИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ В ПОЛЕ ИК-ПОДСВЕТКИ n-Si, ОБЛУЧЁННОГО БЫСТРЫМИ НЕЙТРОНАМИ РЕАКТОРА

А.П. Долголенко, П.Г. Литовченко

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев, Украина

E-mail: odolgolenko@kinr.kiev.ua

Рассчитана температурная зависимость кинетических коэффициентов, измеренных в темноте и при ИК-подсветке за краем собственного поглощения Ge- и Si-фильтров, и описано поведение подвижности электронов в высокоомном кремнии, выращенном методом бестигельной зонной плавки, после облучения быстрыми нейтронами реактора. В рамках уточненной модели кластеров дефектов рассчитана температурная зависимость концентрации электронов и дрейфовых барьеров при их диффузном движении в образцах кремния. Обосновано, что дивакансии в кластерах дефектов находятся в конфигурации с большей дисторсией.

ВВЕДЕНИЕ

В нескольких фундаментальных исследованиях хорошо установлено, что быстрые нейтроны создают в кремнии кластеры дефектов, в которых дивакансии являются основными дефектами, стабильными при комнатной температуре [1–3]. Метод молекулярных орбиталей подтвердил результаты метода функционала плотности и представление о двухъямном потенциале дивакансии в кремнии [4] в нейтральном и заряженных состояниях. 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 [5, 6]. Дивакансия как глубокий пятизарядный двухъямный центр подвержена эффекту Яна-Теллера с характерными электронными полосами инфракрасного поглощения [7] и фотопроводимости. В зависимости от зарядового состояния дивакансии экспериментально в кремнии наблюдались три основные полосы поглощения $\lambda = 1,7$ мкм (0,73 эВ) дивакансий в нейтральном состоянии (V_2^0) при 80 К и $\lambda = 1,8$ мкм (0,69 эВ) при комнатной температуре. Основную полосу $\lambda = 3,6$ мкм (0,344 эВ) и IR-поглощение вблизи 0,36 эВ полос: $\lambda = 3,45$ мкм (0,359 эВ), $\lambda = 3,3$ мкм (0,376 эВ) и $\lambda = 3,07$ мкм (0,404 эВ), обусловленное фононным повторением основной полосы $\lambda = 3,6$ мкм, можно связать с переходом V_2^{2-} в возбужденное состояние $E_c - 0,075$ эВ [8]. Полоса $\lambda = 3,9$ мкм (0,32 эВ) связана с фотовозбуждением V_2^+ и экспериментальным наблюдением дырочной фотопроводимости [9]. В работе [5] высказано предположение, что наблюдаемые различными методами уровни дивакансии в запрещенной зоне кремния являются совместным проявлением уровней дивакансии в различных конфигурациях, концентрация которых определяется деформацией решетки кремния и зависит от концентрации дефектов межузельного типа. Достаточно точное определение

корреляционной энергии дивакансий в кремнии в различных конфигурациях с большей и меньшей дисторсиями позволяет более полно рассмотреть взаимодействие инфракрасного света за краем собственного поглощения кремния с уровнями дивакансии в различных зарядовых состояниях.

Цель работы – рассчитать кинетические коэффициенты облученного быстрыми нейтронами n-Si из холловских измерений образцов в темноте и при освещении инфракрасным светом.

ЭКСПЕРИМЕНТ И РЕЗУЛЬТАТЫ

В работе исследовались образцы n-типа Si ($n_0 = 5,6 \cdot 10^{12}$ см⁻³), выращенные методом бестигельной зонной плавки, после облучения $3,85 \cdot 10^{12}$ н⁰·см⁻² флюенсом (Φ) быстрых нейтронов реактора. Облучение проводилось на горизонтальном канале реактора ВВР-М при комнатной температуре при потоке $5 \cdot 10^8$ н⁰/(см²·с). Поток быстрых нейтронов с точностью ~ 10% был определен пороговым детектором ³²S (пороговая энергия $E = 0,95$ МэВ) и приведен к энергии нейтронов начиная с ~ 100 кэВ согласно теоретическому спектру нейтронов. Измерение удельной проводимости и постоянной Холла (в темноте и при подсветке инфракрасным светом) проводилось на крестообразных образцах с точностью ~ 1 и ~ 3% соответственно стандартным компенсационным методом. При измерениях ИК световой поток от глобара и магнитное поле 4,1 Тл были направлены перпендикулярно к площади образца размером 10x4 мм и толщиной 1,0 мм. Интенсивность падающего света за краем собственного поглощения Ge- и Si-фильтров изменялась за счет их толщины в пределах 0,5...2 мм.

Экспериментальные результаты представлены на рис. 1–3. На рис. 1 показаны температурные зависимости кинетических коэффициентов n-Si, измеренных в темноте и при ИК-подсветке за краем собственного поглощения Ge- и Si-фильтров, и поведение подвижности электронов в высокоомном кремнии, выращенном методом бестигельной зонной плавки, после облучения быстрыми нейтронами ре-

актора. Расчет концентрации носителей выполнен в рамках уточненной модели Госсика. Подвижность электронов при их диффузном движении в n-Si описана с учетом температурной зависимости дрейфовых барьеров. Дрейфовые барьеры (см. рис. 2) в проводящей матрице рассчитаны в предположении независимости от температуры измерения отношения средней к локальной концентрации электронов в образце. На рис. 3 приведена температурная зависимость удельного сопротивления (ρ) n-Si, измеренного в темноте и при подсветке. Расчет выполнен в

рамках теории эффективной среды с учетом дрейфовых барьеров в проводящей матрице образцов и перезарядки дефектов в областях пространственного заряда кластеров дефектов.

Уровни различных зарядовых состояний дивакансии в кремнии и германии в зависимости от конфигурации Q_1 с большей или Q_2 с меньшей дисторсиями приведены в табл. 1. В табл. 2 представлены результаты расчета температурных зависимостей концентрации носителей: энергии радиационных дефектов.

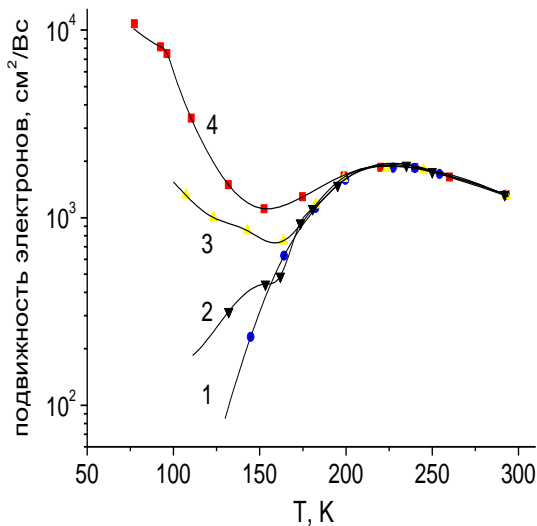
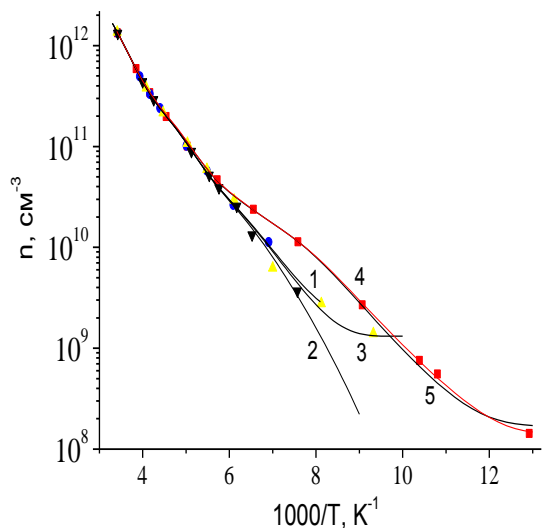


Рис. 1. Температурные зависимости эффективной концентрации и подвижности электронов в n-Si ($n_0 = 5,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, Fz), облученном быстрыми нейтронами реактора флюенсом $\Phi = 3,85 \cdot 10^{12} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ при измерении: 1 – в темноте; 2 – через Ge-фильтр ($h = 0,5 \text{ мм}$); 3 – через Si-фильтр ($h = 1,0 \text{ мм}$); 4 и 5 – через Si-фильтр ($h = 0,5 \text{ мм}$) при подсветке ИК-светом от глобара.
♦ - экспериментальные значения; линии – расчет с учетом $\Sigma_1 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ и без учета (см. кривую 5)

Таблица 1

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

СТАТИСТИКА ЗАПОЛНЕНИЯ АКЦЕПТОРНЫХ СОСТОЯНИЙ ДИВАКАНСИИ В n-Si

Допустим, что при рассеянии быстрого нейтрона на атомах кремния образуется кластер дефектов, окруженный областью пространственного заряда, объемом V . Пусть при флюенсе Φ образуется N таких областей в единице объема кристалла. Тогда $N = \Sigma \Phi$, где Σ – макроскопическое сечение образования кластера. При увеличении N на dN изолирующий объем кластеров увеличивается на $V dN$, а часть $F = 1 - f$ остается проводящей. Поэтому уменьшение свободного объема dF , не занятого кла-

стерами, при введении кластеров объемом $V dN$ пропорционально этому объему: $\frac{dF}{V dN} = -F$.

После разделения переменных и интегрирования (начальные условия $\Phi = 0, F = 1$) имеем $F = \exp(-VN)$. Окончательно доля объема, занятая кластерами, равна

$$f_0 = 1 - \exp(-\Sigma V \Phi). \quad (1)$$

Как можно видеть, полученное уравнение (1) учитывает только геометрическое перекрытие кластеров дефектов, обусловленное статистическим законом взаимодействия быстрых нейтронов с атомами кристалла. Дополнительное перекрытие, обусловленное введением точечных дефектов в области

пространственных зарядов кластеров дефектов, можно учесть с помощью интеграла перекрытия:

$$f = f_0 \exp(-\Sigma_1 V \Phi), \quad (2)$$

где Σ_1 – вероятность перекрытия кластеров дефектов, см^{-1} ; f_0 – доля объема, занятого кластерами дефектов.

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

$$f = (1 - \exp(-\Sigma V \Phi)) \cdot \exp(-\Sigma_1 V \Phi). \quad (3)$$

Средний статистический кластер в n-Si, облученном быстрыми нейтронами, содержит концентрацию дефектов (дивакансий) $> 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [10]. Следовательно, модель Госсика [11], которая требует, чтобы условие $L_1 \ll R_1 \ll R_2$ было удовлетворено, будет применима к n-типу кремния, имеющего сопротивление больше 40 Ом·см. Для объема кластера $V(T)$ в зависимости от температуры измерения (T) получим

$$V(T) = \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0 R_1}{q N_2} \cdot \Psi_p(T), \quad (4)$$

где L_1 – длина дебаевского экранирования в области скопления дефектов; R_1 и R_2 – средние радиусы скопления дефектов и области пространственного заряда кластеров дефектов соответственно.

В уравнении (4) ϵ и ϵ_0 – диэлектрические постоянные материала и вакуума соответственно; q – заряд электрона; N_2 – некомпенсированная концентрация доноров в n-типе матрицы; $\Psi_p(T)$ – суммарное различие в электростатическом потенциале между матрицей и центром разупорядоченной области, которая предполагается сферической.

Известно, что уровень Ферми связан с термодинамическими характеристиками системы. Поэтому можно определить μ и $kT \ln(N_c(T)/N_2(T, \Phi))$ как приращение свободной энергии системы (кластера и проводящей матрицы) при добавлении к ней одного электрона при условии постоянства объема и температуры. Тогда $q^2 N_2(T, \Phi)/4\pi\epsilon\epsilon_0 \Sigma R_1 \Phi$ можем определить как уменьшение свободной энергии всей системы при образовании в единице объема $\Sigma \Phi$ кластеров дефектов. Поэтому

$$\Psi_p(T) = \mu - kT \ln\left(\frac{N_c(T)}{N_2(T)}\right), \quad (5)$$

где μ – положение уровня Ферми в центре кластера относительно дна зоны проводимости; $N_c(T)$ – эффективная плотность состояний в зоне проводимости.

В собственном кремнии уровень Ферми будет располагаться на нейтральном уровне дивакансии (по нашим оценкам $E_v + 0,53$ эВ). При захвате электрона проводимости (поставляемого ионизацией легирующей примеси) энергия центра возрастает на $\sim 0,165$ эВ [12]. С увеличением уровня легирования n-Si уровень Ферми можно определить, если пред-

положить нахождения дивакансий в кластере в конфигурации с большей дисторсией:

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

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

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

$$\Sigma_1(T) = \Sigma_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right), \quad (7)$$

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

В работе [13] показано, как эффективная концентрация носителей (n_{ef}), определяемая из измерений эффекта Холла, зависит от доли проводящего объема матрицы. Тогда n_{ef} , в зависимости от флюенса и температуры измерения, равно

$$n_{ef}(T, \Phi) = n(T, \Phi) \cdot (1 - f(T, \Phi)), \quad (8)$$

где $n(T, \Phi)$ – концентрация носителей в проводящей матрице n-Si; $f(T, \Phi)$ – доля объема, занятая кластерами дефектов при температуре T после флюенса Φ .

Рассмотрим полупроводник n-Si, легированный атомами фосфора с чистой концентрацией N_d и средней степенью компенсации акцепторами (бор), в области от комнатной температуры 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 ($N_d < 10^{14} \text{ см}^{-3}$). 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 $N_2(T, \Phi)$;

$$n(T, \Phi, E_a) = \frac{1}{2} \left(N_d - \frac{N_a(\Phi)}{\lambda} - n_{11} \right) \sqrt{1 + \frac{4N_d n_{11}}{\left(N_d - \frac{N_a(\Phi)}{\lambda} - n_{11} \right)^2} + 1}; \quad (9)$$

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

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

Искривление энергетических зон в кластере на расстоянии дебаевского экранирования при пони-

жении температуры приводит к пространственно-неоднородному захвату электрона на дефект акцепторного типа, согласно (8). Если акцепторный дефект находится в проводящей матрице, то $\lambda = 1$, а в случае его локализации в области пространственного заряда кластера – $\lambda = 1,5$. Величина $\lambda = 1,5$ сохраняется во всей области исследованных доз облучений [14] n-Si-образцов, легированных фосфором (P) в интервале концентраций $10^{12} \dots 10^{14} \text{ см}^{-3}$.

Предполагалось, что в случае отсутствия статистического взаимодействия между уровнями радиационных дефектов, концентрации носителей в проводящей матрице n-Si можно определить, если вычислить суммарную концентрацию электронов $\sum_i n_i(T, \Phi, E_i)$, которые будут поставляться в зону проводимости при ионизации акцепторных уровней $n(T, \Phi) = \sum_i n_i(T, \Phi, E_i) - 3 \cdot N_0 + 2 \cdot N_a(\Phi) + N_{a1}(\Phi)$, (10)

где $i = 4$ – присутствуют в проводящей матрице четыре акцепторных уровня дефектов; N_0 – концентрация электронов в n-Si при комнатной температуре; $N_a(\Phi)$ – концентрация самого глубокого акцепторного уровня.

Концентрацию экранирующих центров в областях пространственного заряда кластеров дефектов можно определить согласно уравнению (9) с $\lambda = 1,5$:

$$N_2(T, \Phi) = \sum_i N_{2i}(T, \Phi, E_i) - 3 \cdot N_0 + \frac{N_a(\Phi)}{\lambda} + \frac{N_{a1}(\Phi)}{\lambda}, \quad (11)$$

где $i = 4$ – в области пространственного заряда кластера дефектов присутствуют четыре акцепторных дефекта; $N_{a1}(\Phi)$ – концентрация следующего акцепторного радиационного дефекта.

Рассмотрим область температур ($T > 100 \text{ K}$), 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 $T > 100 \text{ K}$ равна [15]:

$$\mu_H = A_1 \mu_d \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right) \cdot \frac{(1-\delta) n}{1+Bf \langle n \rangle}, \quad (12)$$

где μ_d – дрейфовая подвижность носителей до облучения; A_1 – холл-фактор в образце до облучения с учетом диффузного движения электронов [16]; f – доля объема диэлектрических включений (кластеров); B – коэффициент поляризации кластеров дефектов в электрическом поле [15]; $E_v = E_n - \zeta$ – средняя величина дрейфовых барьеров, определяемая как разность энергии между «уровнем протекания» (E_n) и уровнем химического потенциала (ζ).

Согласно Herring [17], изменение подвижности носителей равно $\delta = \varepsilon/3$, где ε – среднеквадратичное отклонение концентрации основных носителей от среднего значения $\langle n \rangle$. 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 $\delta = \frac{f \cdot F}{3}$, F – доля объема «озер», где отсутствует объемный заряд.

Теория эффективной среды [18] описывает экспериментально измеренную температурную зависимость проводимости образца как двухфазную систему (проводящая матрица и кластеры дефектов эффективного среднестатистического радиуса) с помощью параметра $X = \sigma_1/\sigma$ – отношения проводимостей этих фаз. Проводимость в проводящей матрице кремния в первом приближении равна:

$$\sigma = qn\mu_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right); \quad \sigma_1 = \text{const}, \quad (13)$$

где μ_0 – дрейфовая подвижность электронов до облучения.

Как показано в работе [15], предположение $\sigma_1 = \text{const}$ уже себя не оправдывает, а экспериментально измеряемая проводимость ведёт себя активационным образом. Тогда можно предположить, что проводимость кластеров

$$\sigma_1(T) = D \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{2kT}\right). \quad (14)$$

РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ В n-Si (Fz)

Температурные зависимости эффективной концентрации (n_{ef}) электронов в n-Si, облученном быстрыми нейтронами реактора при комнатной температуре (T), были вычислены в рамках уточненной модели Госсика на основе формул (3)–(11) в предположении, что каждый рассеянный быстрый нейтрон с вероятностью $\Sigma = 0,15 \text{ см}^{-1}$ создает кластер дефектов со среднестатистическим размером $R_1 = 7 \cdot 10^{-9} \text{ м}$.

При вычислениях учитывалось перекрытие областей пространственных зарядов кластеров дефектов, обусловленное перезарядкой радиационных дефектов с помощью интеграла перекрытия (2) с вероятностью $\Sigma_1 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. В табл. 2 приведена вычисленная концентрация дивакансий различного зарядового состояния. Положение дефектов в запрещенной зоне n-Si определено на основе проведенных измерений в темноте и при подсветке ИК-светом через Si- и Ge-фильтры толщиной 0,5 и 1,0 мм. Согласно (6) определено положение уровня Ферми (μ) $\mu = E_c - 0,509 \text{ эВ}$ в ядре усредненного кластера и протяженность пространственного заряда $R_2 = 6,72 \cdot 10^{-5} \text{ см}$ при $T = 294 \text{ K}$.

Температурные зависимости подвижности электронов при измерении в темноте и при подсветке ИК-светом через фильтры были вычислены по формуле (12), которая описывает диффузное движение электронов в проводящей матрице n-Si с учетом полученных температурных зависимостей дрейфовых барьеров (рис. 2).

Параметры расчета концентрации и энергетического положения радиационных дефектов в запрещенной зоне n-Si образца после облучения и измерений в темноте и при подсветке за краем собственного поглощения Ge- и Si-фильтров ИК-светом от глобара

$\Phi, \text{п}^0/\text{см}^2$	$n_0, \text{см}^{-3}$	$E_c - E_a, \text{эВ}$	$N_d, \text{см}^{-3}$	$N_a, \text{см}^{-3}$	Толщина фильтра, мм
$3,85 \cdot 10^{12}$	$5,6 \cdot 10^{12}$	0,51	$5,6 \cdot 10^{12}$	$1,6 \cdot 10^{12}$	–
		0,425	$4,0 \cdot 10^{12}$	$2,0 \cdot 10^{12}$	–
		0,39	$2,0 \cdot 10^{12}$	$9,0 \cdot 10^{11}$	–
		0,23	$1,1 \cdot 10^{12}$	$1,0 \cdot 10^{12}$	–
		0,51	$5,6 \cdot 10^{12}$	$1,6 \cdot 10^{12}$	Ge
		0,425	$4,0 \cdot 10^{12}$	$2,0 \cdot 10^{12}$	$h = 0,5$
		0,39	$2,0 \cdot 10^{12}$	$9,0 \cdot 10^{11}$	–
		0,23	$1,1 \cdot 10^{12}$	$1,13 \cdot 10^{12}$	–
		0,51	$5,6 \cdot 10^{12}$	$1,6 \cdot 10^{12}$	Si
		0,425	$4,0 \cdot 10^{12}$	$2,0 \cdot 10^{12}$	$h = 1,0$
		0,39	$2,0 \cdot 10^{12}$	$9,0 \cdot 10^{11}$	–
		0,23	$1,1 \cdot 10^{12}$	$1,03 \cdot 10^{12}$	–
		0,51	$5,6 \cdot 10^{12}$	$1,6 \cdot 10^{12}$	Si
		0,425	$4,0 \cdot 10^{12}$	$2,0 \cdot 10^{12}$	$h = 0,5$
		0,39	$2,0 \cdot 10^{12}$	$8,5 \cdot 10^{11}$	–
		0,23	$1,15 \cdot 10^{12}$	$4,5 \cdot 10^{11}$	–
0,19	$7,0 \cdot 10^{11}$	$6,92 \cdot 10^{11}$	–		

Параметр $B = L_x / (1 - L_x)$ и коэффициент деполяризации кластеров дефектов ($L_x = 1,2 \cdot \Psi_p^{1,3}$) в электрическом поле определялись после вычисления потенциальных барьеров по формуле (5) усредненного кластера дефектов в зависимости от температуры при измерении.

Холловская подвижность и эффективная удельная проводимость взаимосвязаны через эффективный коэффициент Холла [15] в рамках теории эффективной среды [18].

Метод расчета температурных зависимостей дрейфовых барьеров после различных времен выдержки при комнатной температуре n-Si подробно описан в работе [15].

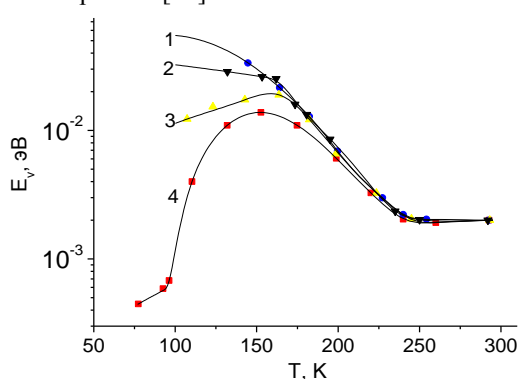


Рис. 2. Температурная зависимость дрейфовых барьеров в проводящей матрице в n-Si ($n_0 = 5,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, Fz), облученном быстрыми нейтронами реактора флюенсом $\Phi = 3,85 \cdot 10^{12} \text{ п}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ при измерении: 1 – в темноте; 2 – через Ge-фильтр ($h = 0,5 \text{ мм}$); 3 – через Si-фильтр ($h = 1,0 \text{ мм}$); 4 – через Si-фильтр ($h = 0,5 \text{ мм}$) при подсветке ИК-светом от глобара.
◆ – расчетные значения; линии – огибающие кривые

Величины дрейфового барьера и $\langle n \rangle / n$ определялись при комнатной температуре, эффективный радиус кластеров дефектов – в области температур эффективной максимальной проводимости, а проводимость кластеров подбиралась при низких температурах и при вычислении удельной проводимости в рамках уточненной теории эффективной среды. Температурные зависимости дрейфовых барьеров (см. рис. 2) были вычислены в приближении, что $\langle n \rangle / n$ есть только слабая функция дозы облучения быстрыми нейтронами реактора и не зависит от температуры измерения.

После дозы облучения $\Phi = 3,85 \cdot 10^{12} \text{ п}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ лучшее описание $\rho_1(T) = \sigma_1(T)^{-1}$ (рис. 3, кривые 1 и 2) получено в соответствии с формулой (14) при $D_1 = 1 \cdot 10^{-1}$ и $D_2 = 8,3 \cdot 10^{-2} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$, $E_a = 0,31 \text{ эВ}$ при измерении и в темноте, и при ИК-подсветке через Ge-фильтр.

Таким образом, перезарядка усредненного уровня радиационных центров $E_c - 0,42 \text{ эВ}$ и $E_c - 0,51 \text{ эВ}$ в областях пространственного заряда кластеров дефектов привела к активационному поведению проводимости n-Si. Такое активационное поведение уровня дивакансии в кластерах наблюдалось и при ИК-подсветке за краем собственного поглощения Si-фильтров различной толщины (h). Электроны в кластерах захватываются не только на виртуальный уровень дивакансии $E_a = 0,261/\lambda \text{ эВ}$ в Q_1 -конфигурации (см. рис. 3, кривая 3), но и на ее первый возбужденный $E_c - 0,065 \text{ эВ}$ уровень (см. рис. 3, кривая 5) с $D_a = 1 \cdot 10^{-3}$ и $D_b = 5 \cdot 10^{-6} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ коэффициентами соответственно. Тогда $\sigma_1(T) = \sigma_a(T) + \sigma_b(T)$. Именно кванты света с энергией вблизи $0,36 \text{ эВ}$ ответственны за заброс электронов на первый возбужденный уровень дважды отрицательной дивакансии $E_c - 0,065 \text{ эВ}$ при $D_c = 4 \cdot 10^{-5} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ в случае подсветки через Si-фильтр ($h = 0,5 \text{ мм}$).

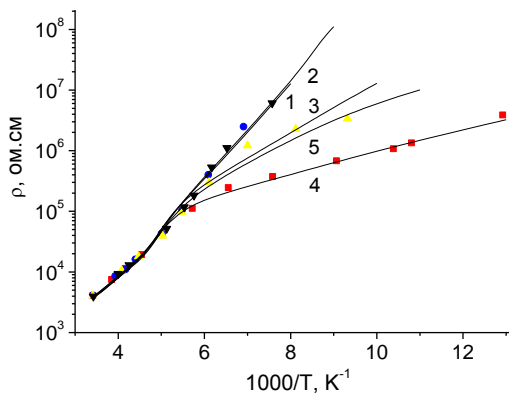


Рис. 3. Температурная зависимость удельного сопротивления *n*-Si ($n_0 = 5,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, Fz), облученного быстрыми нейтронами реактора флюенсом $\Phi = 3,85 \cdot 10^{12} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ при измерении: 1 – в темноте; 2 – через Ge-фильтр ($h = 0,5 \text{ мм}$); 3 и 5 – через Si-фильтр ($h = 1,0 \text{ мм}$); 4 – через Si-фильтр ($h = 0,5 \text{ мм}$) при подсветке ИК-светом от глобара.

◆ – экспериментальные значения;
линии – расчетные кривые

Искривление изоэнергетических зон в областях пространственного заряда кластеров, где $\lambda = 1,5$, обусловило смещение области перезарядки дефектов в область более низких температур. И для этого «виртуального» уровня не существует компенсирующих дефектов. Таким образом, в теории эффективной среды надо учитывать не только дрейфовые барьеры в проводящей матрице, но и изменение проводимости кластеров за счет перезарядки радиационных дефектов в областях пространственного заряда кластеров дефектов.

ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 и табл. 2 видно, что в кремнии быстрыми нейтронами создаются не только кластеры дефектов с высокой концентрацией дефектов, но и те же дефекты находятся в проводящей матрице образцов. Полученные значения энергетических положений дефектов в запрещенной зоне при сравнении с литературными данными показывают, что $E_c-0,425 \text{ эВ}$ и $E_c-0,23 \text{ эВ}$ принадлежат дивакансии, причем концентрация отрицательно заряженных в два раза больше наблюдаемой концентрации дважды отрицательно заряженных дивакансий. Такой уровень $E_c-0,23 \text{ эВ}$ дивакансии ($V_2^{2-/-}$) среди значений табл. 1 отсутствует, но такой уровень можно экспериментально наблюдать, если концентрация дивакансии ($V_2^{2-/-}$) в конфигурации с большей дисторсией (Q_1) в два раза больше концентрации – с меньшей дисторсией (Q_2). Тогда энергия уровня $E_c-0,23 \text{ эВ}$ равняется $(0,26 \cdot 2/3 + 0,17 \cdot 1/3)$, как предположено в работе [5].

В табл. 2 видно, что концентрация обобщенного уровня $E_c-0,23 \text{ эВ}$ увеличилась на 13% при подсветке ИК-светом за краем собственного поглощения Ge-фильтра. Можно предположить, кванты ИК-света с $\lambda = 2,2 \text{ мкм}$ ($0,564 \text{ эВ}$) [8] возбуждают электроны из валентной зоны на обобщенный нейтральный уровень $E_c-0,503 \text{ эВ}$ дивакансии с энергией

$(0,53 \cdot 2/3 + 0,45 \cdot 1/3)$ и с передачей импульса и энергии ($0,064 \text{ эВ}$) фонону. Заселенность уровня $E_c-0,425 \text{ эВ}$ отрицательно заряженной дивакансии увеличивается и, следовательно, будет увеличиваться концентрация обобщенного уровня $E_c-0,23 \text{ эВ}$ дивакансии ($V_2^{2-/-}$). Свободные дырки захватываются в кластеры дефектов.

При подсветке ИК-светом за краем собственного поглощения Si-фильтра концентрация обобщенного уровня $E_c-0,23 \text{ эВ}$ уменьшилась больше, чем в два раза. Тогда можно предположить, что кванты ИК-света с $\lambda = 1,3 \text{ мкм}$ ($0,954 \text{ эВ}$) [19] возбуждают электроны из валентной зоны на уровень дивакансии (V_2^{2-}) в Q_1 -конфигурации с большей дисторсией, и заселенность уровня $E_c-0,23 \text{ эВ}$ уменьшается, а концентрация трижды заряженной дивакансии $E_c-0,09 \text{ эВ}$ растет (см. табл. 1). Когда уровень Ферми пересекает уровень дивакансии ($V_2^{-/0}$), как в нашем случае при комнатной температуре, то дивакансии находятся в трех зарядовых состояниях (0, 1-, 2-), так как обе полосы $0,36$ и $0,69 \text{ эВ}$ наблюдаются одновременно [7].

Кванты ИК-света $\lambda = 1,8 \text{ мкм}$ ($0,69 \text{ эВ}$) фотовозбуждают электроны из валентной зоны на уровень дивакансии ($V_2^{-/0}$), а $\lambda = 3,6 \text{ мкм}$ ($0,344 \text{ эВ}$) переводят их на возбужденный уровень $E_c-0,065 \text{ эВ}$ дивакансии ($V_2^{2-/-}$). Кванты ИК-света $\lambda = 2,85 \text{ мкм}$ ($0,435 \text{ эВ}$) фотовозбуждают электроны с уровня дивакансии ($V_2^{-/0}$) в зону проводимости. Возможно, поэтому, рассчитанная концентрация дивакансии ($V_2^{-/0}$) не изменяет своей концентрации при подсветке ИК-светом за краем собственного поглощения через Ge- и Si-фильтры. Но появляется уровень дивакансии, модифицированной углеродом $E_c-0,19 \text{ эВ}$ ($CV_2^{2-/-}$), а концентрация уровня $E_c-0,39 \text{ эВ}$ ($CV_2^{-/0}$) только слегка уменьшается. Не исключено, что увеличение концентрации обобщенного уровня $E_c-0,23 \text{ эВ}$ дивакансии ($V_2^{2-/-}$) связано с фотовозбуждением конфигурационного перехода дивакансии с большей в меньшую дисторсию.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассчитаны кинетические коэффициенты в *n*-Si, облученном быстрыми нейтронами, по холловским измерениям в темноте и при подсветке ИК-светом за краем собственного поглощения Ge- и Si-фильтров. Определены параметры кластеров дефектов и дрейфовые барьеры в проводящей матрице образцов. Рассмотрено влияние известных полос ИК-поглощения, которые могут быть ответственны за изменение заселенности дважды отрицательно заряженной дивакансии в кремнии. Приведены доказательства, что основными дефектами в кластерах являются дивакансии в конфигурации с большей дисторсией. Подтверждено, что при описании температурной зависимости удельного сопротивления в рамках теории эффективной среды надо учитывать захват электронов в кластерах на уровни дефектов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. L.J. Cheng, J. Lori. Temperature dependence of production rate of divacancy and near edge absorption

in Si by fission neutrons // *Appl. Phys. Lett.* 1970, v. 16, N 8, p. 324-325.

2. R.C. Yong, J.C. Corelli. Photoconductivity studies of radiation induced defects in silicon // *Phys. Rev. B.* 1972, v. 5, N 4, p. 1455-1467.

3. 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; p. 555-560.

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

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

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

7. F. Carton-Merlet, B. Pajot, D.T. Don, C. Porte, B. Clerjand, and P.M. Mooney. Photo-induced changes in the change state of the divacancy in neutron and electron irradiated silicon // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1982, v. 15, p. 2239-2255.

8. М.Т. Лаппо и В.Д. Ткачев. О дивакансии в кремнии, облученном быстрыми нейтронами // *ФТП.* 1970, т. 4, в. 11, с. 2192-2195.

9. В.А. Войтенко, С.Е. Мальханов. Наблюдение диэлектрической локальной моды, связанной с дивакансией в n-Si // *ЖЭТФ.* 1997, т. 112, в. 2(8), с. 707-713.

10. B.C. Mac Evoy, S.J. Watts. Defect Engineering Radiation Tolerant Silicon Detectors // *Proc. of the 7th Inter. Autumn Meeting, Gettering and Defect Engineering in Semiconductor Technology (GADEST' 97)*, (Spa, Belgium, Oct. 5 – 10, 1997), p. 221-232.

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

12. A.P. Dolgolenko, P.G. Litovchenko, A.P. Litovchenko, M.D. Varentsov, V.F. Lastovetsky, G.P. Gaidar. Influence of growing and doping methods on radiation hardness of n-Si irradiated by fast-pile neutrons // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics.* 2004, v. 7, N 1, p. 8-15.

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

14. 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, p. 407-411.

15. А.П. Долголенко. Диффузное и дрейфовое движение электронов в n-типе кремния, облученного быстрыми нейтронами реактора // *Ядерная физика и атомная энергетика (12).* 2011, №2, с. 167-172.

16. Л.И. Шпинар, И.И. Ясковец. К теории проводимости и эффекта Холла в неоднородных полупроводниках // *ФТТ.* 1984, т. 26, в. 6, с. 1725-1730.

17. Herring Conyers. Effect of Random Inhomogeneities on Electrical and Galvanomagnetic Measurements // *J. Appl. Phys.* 1960, v. 31, N 11, p. 1939-1953.

18. H. Morrel. Cohen and Joshua Jortner. Effective medium theory for the Hall Effect in disordered materials // *Physical Review Letters.* 1973, v. 30, N 15, p. 696-698.

19. Н.И. Акулович, В.В. Петров, В.Д. Ткачев. Фотопроводимость кремния, обусловленная различными зарядовыми состояниями дивакансии // *ФТП.* 1976, т. 10, в. 6, с. 1038-1044.

Статья поступила в редакцию 20.10.2014 г.

КІНЕТИЧНІ КОЕФІЦІЄНТИ В ПОЛІ ІЧ-ПІДСВІЧУВАННЯ n-Si, ОПРОМІНЕНОГО ШВИДКИМИ НЕЙТРОНАМИ РЕАКТОРА

А.П. Долголенко, П.Г. Литовченко

Розрахована температурна залежність кінетичних коефіцієнтів, виміряних у темряві і при ІЧ-підсвічуванні за краєм власного поглинання Ge- і Si-фільтрів, і описано поведінку рухливості електронів у високоомному кремнії, вирощеному методом безтигельної зонної плавки, після опромінення швидкими нейтронами реактора. У рамках уточненої моделі кластерів дефектів розрахована температурна залежність концентрації електронів і дрейфових бар'єрів при їх дифузному русі в зразках кремнію. Обґрунтовано, що дивакансії в кластерах дефектів знаходяться в конфігурації з більшою дисторсією.

THE KINETIC COEFFICIENTS IN THE FIELD OF IR ILLUMINATION n-Si IRRADIATED BY FAST NEUTRONS REACTOR

A.P. Dolgolenko, P.G. Litovchenko

The temperature dependence of kinetic coefficients measured in darkness and in the IR-illumination from the edge of the intrinsic absorption Ge and Si filters and the description of the behavior of electron mobility in a high-resistance silicon grown by the method of non-crucible zone melting, after irradiation fast neutron reactor was calculated. In the framework of the improved model of cluster defects the temperature dependence of the electron concentration and the drift barriers in their diffuse movement in the silicon samples has been carried out. It is proved that the main defects in clusters are divacancy configuration with more distortion.