

ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ ПОЛОЖЕНИЕ В ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЕ n-Si БИСТАБИЛЬНОГО ДЕФЕКТА $(C_iC_s)^0$ В “В” КОНФИГУРАЦИИ

А. П. Долголенко, П. Г. Литовченко, М. Д. Варенцов, Г. П. Гайдар

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев

Исследован n-Si, выращенный различными методами, после облучения быстрыми нейтронами реактора и последующего отжига при комнатной температуре. Измеренная температурная зависимость эффективной концентрации носителей рассчитана в модельном приближении Госсика с учетом перезарядки дефектов как в проводящей матрице n-Si, так и в областях пространственного заряда кластеров. Это позволило, зная концентрацию носителей в проводящей матрице, определить функцию распределения электронов на акцепторном уровне бистабильного дефекта $(C_iC_s)^0$, когда концентрация акцепторного уровня этого дефекта сама является функцией положения уровня Ферми в проводящей матрице. Определена концентрация (C_iC_s) -углеродной пары и ее энергетическое положение ($E_c - 0,123$ эВ) в запрещенной зоне n-Si. Показано, что в n-Si с высокой концентрацией углерода и кислорода за счет присоединения атомов кислорода к бистабильному дефекту C_iC_s он становится стабильным не только в “А”, но и в “В” конфигурациях с энергетическими уровнями в запрещенной зоне n-Si $(C_iC_s-O)^0$ ($E_c - 0,13$ эВ) и ($E_c - 0,09$ эВ).

Дефектам в полупроводниках, которые обладают бистабильностью электронных свойств, уделяется особое внимание [1, 2]. Эти дефекты наблюдаются во многих полупроводниках, что позволяет апробировать различные механизмы бистабильности. Но при DLTS измерениях затруднено определение энергетического положения этих дефектов, а при холловских измерениях они еще дают вклад в скорость удаления носителей другими дефектами, особенно это касается А-центров в n-Si.

Цель работы – определить энергетическое положение бистабильного дефекта $(C_iC_s)^0$ в “В” конфигурации и долю его “вклада” в температурный интервал заполнения ($E_c - 0,17$ эВ) уровня А-центра.

Известно, что эффективной ловушкой для межузельных атомов кремния, создаваемых в первичных актах рассеяния ядерных частиц, являются углеродные атомы замещения. При комнатной температуре в течение 7 ч после облучения C_i -межузельные атомы углерода эффективно захватываются C_s -углеродными атомами замещения. Механизм бистабильности обусловлен переключением молекулярной связи между двумя конфигурациями (“А” и “В”) C_iC_s -дефекта. В нейтральном зарядовом состоянии дефекта V^0 оба атома углерода находятся в узлах, а атом Si – на связи между ними. При захвате электрона $C_iC_s(V^0)$ -дефектом ($E_c - 0,11$ эВ) он конвертирует в “А” конфигурацию ($E_c - 0,17$ эВ), которая стабильна в отрицательно заряженном состоянии. При этом молекула C_i -Si занимает один узел решетки по соседству с узельным атомом углерода. Но энергетическое положение уровня дефекта есть энергетическая разница между самым нижним состоянием, когда ловушка заполняется, и самым нижним энергетическим состоянием, когда она опустошается, т.е. разница энергий между A^- и V^0+e^- равна ($E_c - 0,15$ эВ) [2], тогда как скорость тепловой эмиссии, измеренная DLTS методом, показала уровень бистабильного дефекта ($E_c - 0,17$ эВ). Но только холловские измерения могут дать истинное положение энергетических уровней бистабильных дефектов.

Исследован n-Si, выращенный методом бестигельной зонной плавки в вакууме (FZ), в атмосфере аргона (Ar) и методом Чохральского (Cz) после облучения на горизонтальном канале быстрыми нейтронами реактора ВВР-М при комнатной температуре. Измерения проводимости и постоянной Холла были выполнены методом Ван дер Пау на квадратных

образцах n-Si размером $10 \times 10 \times 1 \text{ мм}^3$ компенсационным способом. Контакты создавались втиранием алюминия на шлифованную поверхность кремния.

Температурные зависимости эффективной концентрации носителей, измеренные после облучения (2, 4) и после отжига при комнатной температуре (1, 3), представлены на рис. 1 в виде точек, линиями показан теоретический расчет. Положение уровня Ферми в кластерах (μ) определено при дозе облучения быстрыми нейтронами, когда в кластерах и в проводящей матрице положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости выровнялось.

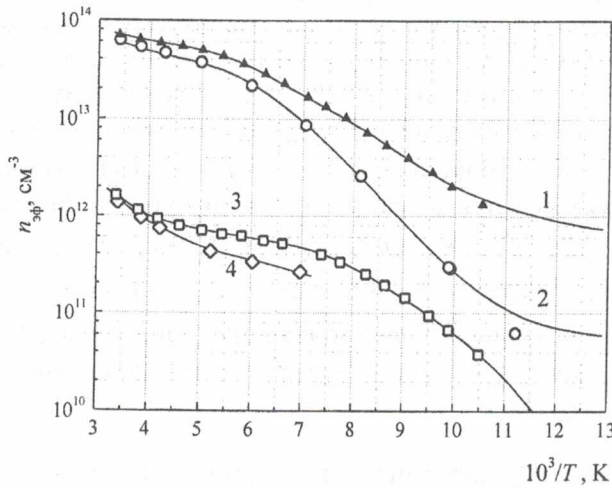


Рис. 1. Температурные зависимости эффективной концентрации электронов после облучения быстрыми нейтронами реактора n-Si (Ar) (1, 2) и n-Si (FZ) (3, 4), полученные при различных временах отжига при комнатной температуре:

- 1 – $\Phi = 4,15 \cdot 10^{13}$ ($n = 1,47 \cdot 10^{14}$), $t = 6500$ ч;
- 2 – $\Phi = 4,15 \cdot 10^{13}$ ($n = 1,47 \cdot 10^{14}$), $t = 10$ ч;
- 3 – $\Phi = 7,55 \cdot 10^{11}$ ($n = 2,81 \cdot 10^{12}$), $t = 7900$ ч;
- 4 – $\Phi = 7,55 \cdot 10^{11}$ ($n = 2,81 \cdot 10^{12}$), $t = 7$ ч.

Как показано в работе [3], эффективная концентрация носителей в образце после облучения

$$n_{эф} = n(1 - f), \tag{1}$$

где n – концентрация носителей в проводящей матрице образца; $f = 1 - \exp(-\Sigma V \Phi)$ – доля объема, занятого кластерами дефектов; Σ – макроскопическое сечение введения кластеров; V – их средний объем, включая область пространственного заряда; Φ – флюенс быстрых нейтронов.

Среднестатистический кластер в n-Si, облученном быстрыми нейтронами, содержит концентрацию дефектов $>10^{19} \text{ см}^{-3}$ [4]. Поэтому, исходя из модели Госсика [5], для объема находим

$$V = \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0 R_1}{q^2 N_2(T)} \left(\mu - kT \ln \frac{N_c(T)}{N_2(T)} \right), \tag{2}$$

где R_1 – средний радиус области скопления дефектов; μ – положение уровня Ферми в кластере относительно зоны проводимости; q – заряд электрона; k – постоянная Больцмана; $N_c(T)$ – плотность состояний в зоне проводимости; $N_2(T)$ – концентрация центров, экранирующих скопление дефектов при температуре T .

Расчет эффективной концентрации носителей выполнен в модельном приближении Госсика с учетом перезарядки дефектов как в проводящей матрице n-Si, так и в областях пространственного заряда кластеров [6]. Перезарядка в температурной области электрической активности акцепторного дефекта была учтена с помощью уравнения, полученного в работе [6]:

$$N_2(T) = \left\{ \left[\frac{1}{2} (g N_c e^{E_a/\alpha kT} - (N_2 - N_a/\alpha)) \right]^2 + g N_c N_2 e^{E_a/\alpha kT} \right\}^{1/2} - \frac{1}{2} (g N_c e^{E_a/\alpha kT} - (N_2 - N_a/\alpha)), \tag{3}$$

где α – коэффициент; $g=2$ – фактор вырождения акцепторного уровня; N_2 , N_a – концентрации доноров и акцепторов соответственно.

Если акцепторный уровень локализован в проводящей матрице, то $\alpha=1$, а в случае его нахождения в области пространственного заряда кластера $\alpha=1,5$. Параметры расчета, согласно уравнениям (1-3), даны в табл. 1, где N_b – концентрация экранирующих центров вне нарушенной области кластеров дефектов среднего радиуса R_1 и при положении уровня Ферми относительно дна зоны проводимости в кластере (μ), Σ – макроскопическое сечение введения кластеров. Измерения проведены через t часов после облучения.

Таблица 1. Вычисленная концентрация (N_a) и энергия уровней (E_a) радиационных дефектов в проводящей матрице n-Si (FZ, Cz, Ar) после дозы облучения быстрыми нейтронами реактора (Φ)

| $\Phi, \text{п}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ | $t, \text{ч}$ | $N_b, \text{см}^{-3}$ | $N_a, \text{см}^{-3}$ | $E_c - E_a, \text{эВ}$ | $R_1, \text{Å}$ | $\Sigma, \text{см}^{-1}$ | $\mu, \text{эВ}$ |
|---|---------------|-----------------------|-----------------------|------------------------|-----------------|--------------------------|------------------|
| $7,55 \cdot 10^{11}$ | 7 | $1,93 \cdot 10^{12}$ | $5,0 \cdot 10^{11}$ | 0,315 | 92 | 0,15 | 0,528 |
| $2,81 \cdot 10^{12}$ (FZ) | 7900 | $2,0 \cdot 10^{12}$ | $1,5 \cdot 10^{12}$ | 0,175 | 87 | 0,145 | |
| | | $5,0 \cdot 10^{11}$ | $5,0 \cdot 10^{11}$ | 0,147 | | | |
| | | | $1,12 \cdot 10^{12}$ | 0,123 | | | |
| $4,15 \cdot 10^{13}$ | 10 | $1,09 \cdot 10^{14}$ | $1,05 \cdot 10^{14}$ | 0,173 | 80 | 0,15 | 0,475 |
| $1,47 \cdot 10^{14}$ (Ar) | 6500 | $1,09 \cdot 10^{14}$ | $7,35 \cdot 10^{13}$ | 0,18 | 63 | 0,132 | |
| | | $3,55 \cdot 10^{13}$ | $2,6 \cdot 10^{13}$ | 0,14 | | | |
| | | | $5,35 \cdot 10^{13}$ | 0,123 | | | |
| $1,89 \cdot 10^{13}$ | 17 | $5,1 \cdot 10^{13}$ | $3,8 \cdot 10^{13}$ | 0,160 | 70 | 0,15 | 0,477 |
| $6,32 \cdot 10^{13}$ (Cz) | 6200 | $4,9 \cdot 10^{13}$ | $1,8 \cdot 10^{13}$ | 0,175 | 40 | 0,132 | |
| | | $3,1 \cdot 10^{13}$ | $1,3 \cdot 10^{13}$ | 0,13 | | | |
| | | $1,8 \cdot 10^{13}$ | $1,3 \cdot 10^{13}$ | 0,09 | | | |

При малых дозах облучения быстрыми нейтронами n-Si, выращенного методом Чохральского, температурная зависимость концентрации носителей обычно описывается наличием дефекта с уровнем ($E_c - 0,16$ эВ) [3], а в бескислородном n-Si ($N_{(O)} < 10^{16} \text{см}^{-3}$) – обычно с уровнем ($E_c - 0,18 \pm 0,01$ эВ). Проведенный отжиг при комнатной температуре облученного n-Si (Cz) показал, что концентрация дефектов в области ($E_c - 0,16$ эВ) уменьшается, а энергетическое положение уровня дефектов становится ($E_c - 0,175$ эВ). Тогда простые вычисления показывают, что отжегся уровень ($E_c - 0,15$ эВ). Из табл. 1 также видно, что отжегся и уровень ($E_c - 0,315$ эВ), так как он после отжига при комнатной температуре 7900 ч отсутствует. Кроме того, выдержка образцов при комнатной температуре привела к изменению параметров кластеров дефектов, что также свидетельствует об их отжиге. Так как основными дефектами в кластерах являются дивакансии, то можно предполагать, что вышеуказанные уровни ($E_c - 0,15$ эВ) и ($E_c - 0,315$ эВ) дефектов, по-видимому, относятся к междузельному типу.

Из табл. 1 видно, что в проводящей матрице облученного быстрыми нейтронами n-Si действительно при холловских измерениях наблюдается уровень ($E_c - 0,147$ эВ), который является отрицательно заряженным состоянием C_1C_s -дефекта в стабильной конфигурации “А”. Он обусловлен переходом бистабильного дефекта $(C_1C_s)^0$ после захвата электрона на уровень ($E_c - 0,10$ эВ) из “В” в “А” конфигурацию. При захвате электрона $B^0 + e^-$ дефектом и конверсии в А-состояние концентрация $(C_1C_s)^0$ -дефектов изменяется в зависимости от

положения уровня Ферми (F) и распределения равновесной концентрации электронов на уровни дефектов. При определении равновесной концентрации электронов обычно исходят из распределения Гиббса с переменным числом частиц. В результате расчета приходим к выводу, что распределение электронов на дефектах, имеющее форму распределения Ферми, отличается от последнего тем, что зависимость концентрации электронов на примесном уровне $n(F)$ от уровня Ферми определяется не только экспонентой в знаменателе, но и концентрация C_iC_s -дефектов $N_a(F)$ также определяется положением уровня Ферми.

Положение уровня Ферми (F) в проводящей матрице n-Si, а также распределение электронов по акцепторным уровням (f_F) с учетом их вырождения можно определить как обычно, так как после учета температурного поведения кластеров дефектов нам известна концентрация носителей $n(T)$ в проводящей матрице. Следовательно, концентрацию $C_iC_s(B^0)$ -дефектов и их энергетическое положение в запрещенной зоне n-Si можно определить, если на "проявление" уровня $C_iC_s(A^-)$ -дефектов ($E_c - 0,147$ эВ) наложить изменение концентрации носителей $n(f)$ в зоне проводимости, обусловленное перезарядкой $C_iC_s(B^0)$ -уровня, когда его концентрация изменяется в процессе его перезарядки. Основываясь на уравнении (3), можно получить перезарядку $C_iC_s(B^0)$ -уровня:

$$n(f) = \frac{1}{2} (N_d - N_a(f) - n_{11}) \cdot \left(\sqrt{1 + \frac{4 N_d n_{11}}{(N_d - N_a(f) - n_{11})^2}} + 1 \right),$$

$$n_{11} = g N_c(T) \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right); \quad N_a(f) = N_s(1 - f_F), \quad (4)$$

где N_d – концентрация доноров; N_s – концентрация $(C_iC_s)^0$ акцепторного и донорного уровня; E_a – энергетическое положение акцепторного уровня $(C_iC_s)^0$ при факторе вырождения $g = 2$.

Описанный метод определения энергетического положения уровня $(C_iC_s)^0$ акцепторного дефекта (4) представлен на рис. 2. Расчет показал, что энергетическое положение акцепторного уровня бистабильного дефекта $(C_iC_s)^0$ в нулевом зарядовом состоянии равно ($E_c - 0,123$ эВ). При холловских измерениях его перезарядка дает вклад Δv в область проявления А-центра ($E_c - 0,175$ эВ), что видно из табл. 2, где также представлены скорости удаления носителей различными уровнями дефектов в n-Si, выращенном разными методами.

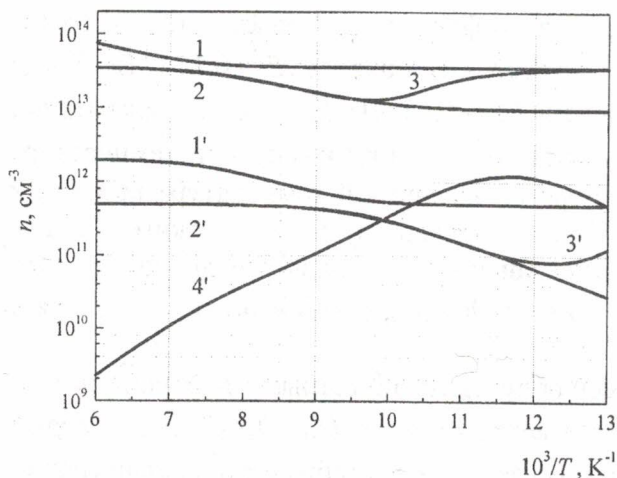


Рис. 2. Температурные зависимости концентрации электронов в проводящей матрице n-Si (Ar) ($n_0 = 1,47 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$), обусловленные проявлением уровней дефектов: 1 – ($E_c - 0,18$ эВ); 2 – ($E_c - 0,14$ эВ); 3 – ($E_c - 0,123$ эВ) и в проводящей матрице n-Si (FZ) ($n_0 = 2,81 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$), обусловленные проявлением уровней дефектов: 1' – ($E_c - 0,175$ эВ); 2' – ($E_c - 0,147$ эВ); 3' – ($E_c - 0,123$ эВ); 4' – скорость перезарядки уровня ($E_c - 0,123$ эВ) дефекта $(C_iC_s)^0$ в n-Si (FZ).

При высокой концентрации углерода и кислорода в n-Si (Cz) существует достаточно большая концентрация CO-молекул, которые являются эффективными центрами захвата не только дивакансий, но и межузельного углерода C_i , подвижного при комнатной температуре.

Таблица 2. Скорость удаления носителей А-центрами ($E_c - 0,175$ эВ), углеродной парой (B^0) и (А) ($E_c - 0,123$ эВ) и ($E_c - 0,147$ эВ), а также димеждоузлиями ($E_c - 0,15$ эВ) в n-Si, выращенном методом зонной плавки (FZ), в атмосфере аргона (Ar) и методом Чохральского (Cz) при облучении быстрыми нейтронами реактора

| Образец кремния | $\nu + \Delta\nu, \text{см}^{-1}$ ($E_c - 0,175$ эВ) | $\nu, \text{см}^{-1}$ ($E_c - 0,147$ эВ) | $\nu, \text{см}^{-1}$ ($E_c - 0,123$ эВ) | $\nu, \text{см}^{-1}$ ($E_c - 0,15$ эВ) |
|-----------------|--|--|--|---|
| Si (FZ) | 1,17 + 0,82 | 0,66 | 1,48 | |
| Si (Ar) | 1,11 + 0,66 | 0,63 ($E_c - 0,14$ эВ) | 1,29 | 0,76 |
| Si (Cz) | 0,95 | 0,69 ($E_c - 0,13$ эВ) | 0,69 ($E_c - 0,09$ эВ) | 1,06 |

Поэтому бистабильный дефект C_iC_s (“А” и “В” конфигурации) трансформируется в дефект C_iC_s-O с энергетическими положениями ($E_c - 0,13$ эВ) и ($E_c - 0,09$ эВ) в “А” и “В” стабильных конфигурациях. Это видно из табл. 2, где скорость введения А-центров ($E_c - 0,175$ эВ) в n-Si (Cz) ($N_{(O)} = 4,3 \cdot 10^{17} \text{см}^{-3}$, $N_{(C)} = 2,5 \cdot 10^{17} \text{см}^{-3}$) даже ниже, чем в n-Si (FZ) ($N_{(O)} < 10^{16} \text{см}^{-3}$).

Таким образом, присоединение кислорода к C_iC_s -дефекту стабилизирует его конфигурации с энергетическими положениями в запрещенной зоне ($E_c - 0,13$ эВ) и ($E_c - 0,09$ эВ). Энергетическое положение C_iC_s -дефекта в “А” конфигурации в запрещенной зоне n-Si равно ($E_c - 0,147$ эВ), а в “В” конфигурации – ($E_c - 0,123$ эВ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jellison G.E., Jr. Transient capacitance studies of an electron trap at $E_c - E_T = 0.105$ eV in phosphorus-doped silicon. // J. Appl. Phys. – 1982. – Vol. 53, No. 8. – P. 5715 – 5719.
2. Song L.W., Zhan X.D., Benson B.W., Watkins G.D. Bistable interstitial-carbon-substitutional-carbon pair in silicon // Phys. Rev. B. – 1990. – Vol. 42, No. 9. – P. 5765 – 5783.
3. 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.
4. Mac Evoy B.C., Watts S.J. Defect Engineering Radiation Tolerant Silicon Detectors // Gettering and Defect Engineering in Semiconductor Technology (GADEST'97): Proc. of the 7th Inter. Autumn Meeting, (Belgium, Spa, Oct. 5 - 10, 1997.). – Belgium, 1997. - P. 221 – 232.
5. Gossick B.R. Disordered Regions in Semiconductors Bombarded by Fast Neutrons // J. Appl. Phys. – 1959. – Vol. 30, No. 8, – P. 1214 – 1218.
6. 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, No. 8. – P. 407 – 411.

ЕНЕРГЕТИЧНЕ ПОЛОЖЕННЯ В ЗАБОРОНЕНІЙ ЗОНІ n-Si БІСТАБІЛЬНОГО ДЕФЕКТУ (C_iC_s)⁰ У “В” КОНФІГУРАЦІЇ

А. П. Долголенко, П. Г. Литовченко, М. Д. Варенцов, Г. П. Гайдар

Досліджено n-Si, отриманий різними методами, після опромінення швидкими нейтронами реактора та після відпалу при кімнатній температурі. Розраховано температурну залежність ефективної концентрації носіїв у модельному наближенні Госсіка з урахуванням перезарядки дефектів у матриці провідності n-Si, а також в областях просторового заряду кластерів. Визначено функцію розподілу електронів на акцепторному рівні бистабільного дефекту (C_iC_s)⁰, коли концентрація акцепторного рівня цього дефекту сама є функцією положення рівня Фермі в матриці провідності. Отримано концентрацію (C_iC_s)⁰-вуглецевої пари та її енергетичне положення ($E_c - 0,123$ еВ) у забороненій зоні n-Si, коли на рівень стабільної конфігурації C_iC_s (А⁻)-дефектів ($E_c - 0,147$ еВ), який спостерігався, було накладено теоретичну зміну концентрації носіїв у зоні провідності, що була викликана перезарядкою (C_iC_s)⁰-рівня, при цьому концентрація дефектів у “В” конфігурації змінювалась у процесі їхньої перезарядки. Показано, що в n-Si з високою концентрацією вуглецю та кисню за рахунок приєднання атомів кисню до бистабільного дефекту C_iC_s він виявляється стабільним не тільки в “А”, але також і в “В” конфігураціях з енергетичними рівнями в n-Si ($E_c - 0,13$ еВ) та ($E_c - 0,09$ еВ).

**ENERGY POSITION OF BISTABLE DEFECT $(C_iC_s)^0$ IN
"B" CONFIGURATION IN A FORBIDDEN ZONE OF n-Si****A. P. Dolgolenko, P. G. Litovchenko, M. D. Varentsov, G. P. Gaidar**

Float-zone and phosphorus-doped n-Si samples after irradiation by fast-pile neutrons and subsequent annealing at room temperature were investigated. The calculation of effective concentration of carriers after irradiation was carried out in the framework of Gossick's model taking into account the recharges of defects both in conducting matrix of n-Si and in the space-charge region of defect clusters. The distribution function of electrons on the acceptor level of bistable defect $(C_iC_s)^0$ when the concentration of this defect is the function of the Fermi level in conducting matrix of n-Si is determined. The concentration of bistable interstitial-carbon-substitutional-carbon pair and its energy level at $(E_c - 0,123 \text{ eV})$ in forbidden band of silicon were calculated. On the observable level of stable configuration $C_iC_s (A^-)$ -defects at $(E_c - 0,147 \text{ eV})$ the theoretical change of carriers concentration in the conduction band simulated by the recharges $(C_iC_s)^0$ was imposed. The concentration of these $(C_iC_s)^0$ -defects has been changed in the process of their recharges. It is shown that in n-Si with high carbon and oxygen concentration after affiliating of oxygen atoms to bistable defect $(C_iC_s)^0$ in a forbidden band of n-Si the stable defects not only in "A" but also in "B" configurations are formed with energy levels at $(E_c - 0,13 \text{ eV})$ and $(E_c - 0,09 \text{ eV})$.

Поступила в редакцию 10.12.02,
после доработки – 28.02.03.