

А. П. Долголенко

*Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев***МОДИФИКАЦИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ И ГЕРМАНИИ
ФОНОВЫМИ ПРИМЕСЯМИ**

Предложена модель модификации основных уровней известных радиационных дефектов в кремнии и германии. Энергия Hubbard является независимой от числа электронов на радиационном дефекте, но ее величина зависит от фоновых примесей вблизи вакансионного дефекта. Если вблизи вакансионного дефекта расположен межузельный атом кислорода, то энергия отрицательно заряженного акцепторного дефекта понижается на 0,06 эВ, а донорного повышается на эту же величину. Межузельный атом кремния или германия изменяет уровни дефекта на 0,03 эВ. Атом углерода в межузлии изменяет энергию вакансионного дефекта на 0,035 эВ, но в противоположном направлении. Модификация вакансионных дефектов не изменяет энергию нейтрального уровня дефекта в запрещенной зоне кремния и германия.

Ключевые слова: кремний, германий, быстрые нейтроны, дивакансия.

Введение

Кремний является модельным полупроводником, так как электронный парамагнитный резонанс (ЭПР) дал возможность определить атомную конфигурацию и электронную структуру радиационных дефектов. К числу наиболее изученных собственных дефектов в кремнии можно отнести дивакансию (V_2) и А-центры (VO). А-центр представляет собой атом кислорода, частично расположенный в вакантном узле решетки, и оборванных связей не имеет. Вместе с тем эксперименты свидетельствуют о том, что А-центр может быть амфотерным дефектом. При исследованиях EPR-методом в кремнии была установлена стабильная конфигурация А-центра [1 - 4] с акцепторным уровнем $E_c - 0,17$ эВ и донорным уровнем $E_c - 0,76$ эВ. В работе [5] проводились измерения тепловой скорости эмиссии и захвата электронов на уровень $E_c - 0,17$ эВ в образцах кремния с Schottky барьером и на р-і-п диодах. Наблюдалось два типа уровней, имеющих различную скорость захвата, но неразличимые скорости эмиссии. Но только А-центр имеет высокую скорость захвата электрона и сечение $\sim 1,0 \cdot 10^{-14}$ см², независимое от температуры. Медленные центры захвата в образцах кремния с Schottky барьером обладают энергией активации ($0,08 \pm 0,015$) эВ сечения захвата электрона на акцепторный уровень с термической энергией активации 0,17 эВ. В случае отжига при 277 °С в течение 4,5 ч он исчезал, а его концентрация не зависела от энергии электронного облучения (в противоположность дивакансии).

Метод молекулярных орбиталей подтвердил результаты метода функционала плотности и представление о двухъямном потенциале дива-

кансии в нейтральном и заряженных состояниях в кремнии [6]. Расчет разностей энергий между абсолютным и метастабильным состояниями для V_2^0 составил 0,07 эВ. Экспериментально показано [7], что в кремнии энергия Hubbard (E_H) для дивакансии в Q_1 конфигурации равна 0,165 эВ, а в Q_2 конфигурации 0,25 эВ и не зависит от числа захваченных электронов. Вблизи вакансии I_{S_i} создает давление несколько килобар на ближайшие от вакансии атомы и понижает энергетическое положение уровней на 0,03 - 0,09 эВ [8]. В работе [9] впервые предложена модель модификации дивакансии фоновыми примесями. На фоне значительного успеха в исследовании радиационных дефектов в кремнии [10] весьма скромно смотрятся подобные исследования в германии [11 - 15]. И только значительный прогресс в эпитаксиальном выращивании $Si_{1-x}Ge_x$ толстых слоев на кремниевой подложке удалось показать, что радиационные дефекты акцепторного и донорного типа уменьшают энергию в запрещенной зоне с увеличением концентрации германия в кремнии [16, 17]. Это позволило увидеть различное поведение положительной и отрицательной дивакансии в зависимости от x . Несомненным успехом является утверждение, что в германии положительно заряженной вакансии не существует [12], а также предположение [18], что рост концентрации $E_{0,23}$ при комнатной температуре обусловлен захватом межузельного атома (I_{Ge}) германия. Изучению проявления пар Френкеля в особо чистом р-Ge при низкотемпературном γ -облучении посвящена работа [19]. Можно считать, что уровень Е-центра ($E_c - 0,37$ эВ) определен достаточно надежно [20]. Уровень $E_{0,29}$ приписан дивакансии, а А-центру – уровень $E_{0,27}$ [18]. Свободная энергия ионизации,

скорость эмиссии и сечение захвата электронов были измерены для основных ловушек носителей, которые производятся в n-Ge облучением электронами при комнатной температуре [21]. Неопределенность положений энергетических уровней дивакансии в различных зарядовых состояниях в запрещенной зоне кремния и германия составила $(0,03 \div 0,05)$ эВ. И одной из причин является модификация уровней радиационных дефектов фоновыми примесями кислорода и углерода в образцах кремния и германия.

Основной задачей данной работы явилось уточнение энергетических положений основных радиационных дефектов в различных зарядовых состояниях в запрещенной зоне кремния и германия в случае их нахождения вблизи фоновых примесей.

Уровни дивакансии в кремнии

На рис. 1 показана температурная зависимость концентрации дырок в валентной зоне p-Si после облучения быстрыми нейтронами реактора и отжига. Расчет показал [7], что $E_v + 0,21$ эВ и $E_v + 0,365$ эВ уровни наблюдаются в равной концентрации, свидетельствуя о том, что эти дефекты находятся в одном и том же зарядовом состоянии. Так как $E_v + 0,21^{0/+}$ эВ – это положение в запрещенной зоне кремния положительно заряженной дивакансии, тогда $E_v + 0,365$ эВ и $E_v + 0,20$ эВ – это положение $V_2(0/+)$ в первой и второй конфигурациях соответственно. В области температур $(230 \div 300)$ К дивакансии меняют свою 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 этих флюенсах облучения высокоомного кремния дивакансии после изохронного отжига $(200 - 325)^\circ\text{C}$ переходят из первой во вторую конфигурацию (см. рис. 1) даже при комнатной температуре. Известно [5], что энергия активации дефекта складывается из энтальпии ионизации и энергии, определяющей вероятность захвата на $E_c - 0,17$ эВ уровень. Этот уровень следует скорректировать на энергию, определяющую температурную зависимость сечения захвата электрона. Тогда этот радиационный дефект с энтальпией ионизации $(0,09$ эВ) в запрещенной зоне кремния будет расположен $E_c - 0,09$ эВ относительно дна зоны проводимости. В случае отжига при 277°C этот дефект исчезал, что совпадает с температурой отжига дивакансий. Концентрация этого дефекта, как и

A-центра, не зависит от энергии электронного облучения. В работе [5] также показано, что $E_c - 0,09$ эВ дефекты в кислородном кремнии и в безкислородных p-i-n диодах показывают сравнительно малую концентрацию по отношению к A-центру.

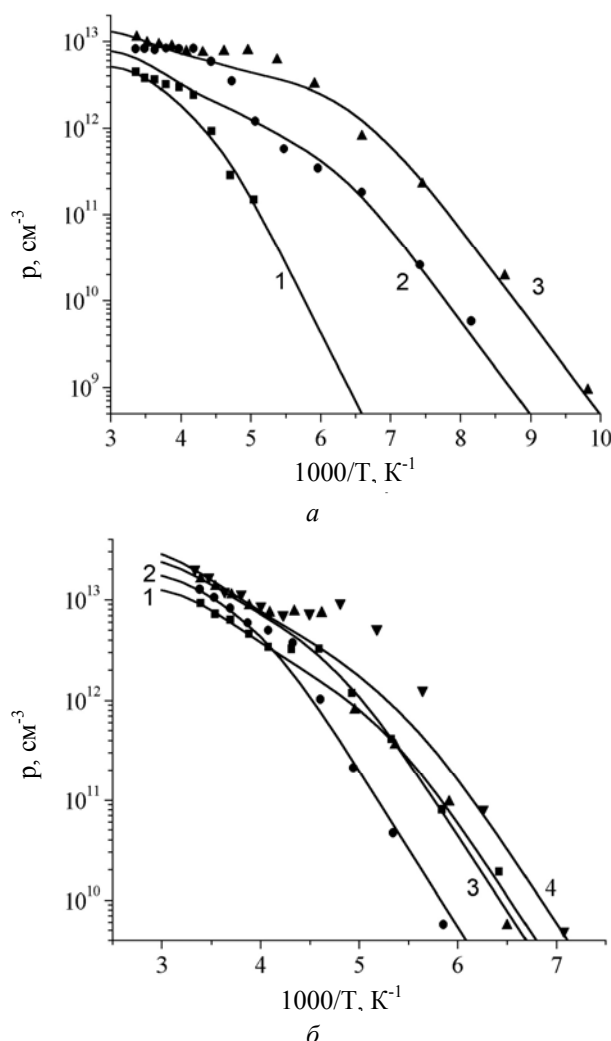


Рис. 1. Температурная зависимость концентрации носителей в p-Si ($p_{00} = 2,62 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$, $p_{00} = 7,09 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$), облученного быстрыми нейтронами реактора ($\Phi_a = 5,0 \cdot 10^{12} \text{ н}^\circ \cdot \text{см}^{-2}$, $\Phi_b = 3,0 \cdot 10^{13} \text{ н}^\circ \cdot \text{см}^{-2}$) соответственно, после изохронного отжига при температуре: а – 1 - 200°C ; 2 - 225°C ; 3 - 250°C ; б – 1 - 250°C ; 2 - 275°C ; 3 - 300°C ; 4 - 325°C . • - эксперимент; — - расчет; отжиг - 30 мин.

Вспомним, что эти дефекты с медленным захватом электронов наблюдались на образцах с барьером Schottky. В таких структурах следует учитывать наличие большого количества дефектов вблизи поверхности кремния (в особенности вакансий). В виду высокой концентрации вакансий вблизи поверхности велика вероятность радиационной вакансии образовать дивакансию, объединившись с вакансией вблизи поверхности. Поэтому скорость введения дивакансий в образ-

цах с барьером Schottky уже не будет зависеть от энергии электронного облучения. Экспериментально показано [7], что в кремнии энергия Hubbard (E_H) для дивакансии в Q_1 конфигурации равняется 0,165 эВ, а в Q_2 конфигурации 0,25 эВ и не зависит от числа захваченных электронов. Тогда можно предположить, что $E_c - 0,09$ эВ является дивакансией в трижды отрицательном заряженном состоянии в первой конфигурации.

А в отрицательном и дважды отрицательном зарядовом состоянии положение уровней дивакансии в кремнии во второй конфигурации равны ($E_c - 0,42$) эВ и ($E_c - 0,17$) эВ соответственно. При этом также предполагалось, что энергия Hubbard не зависит от числа захваченных электронов. Уровни различных зарядовых состояний дивакансии в кремнии в зависимости от конфигурации Q_1 или Q_2 представлены в табл. 1.

Таблица 1. Энергетическое положение уровней дивакансии в различном зарядовом состоянии в кремнии и германии в зависимости от ее атомной конфигурации, эВ

Атомная конфигурация	Зарядовое состояние дивакансии					E_H	ΔE
	3-/2-	2-/-	-/0	0/0	0/+		
Si	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
Ge	Q_1	$E_c - 0,25$	$E_v + 0,25$	$E_v + 0,085$	$E_v - 0,08$		0,165
	Q_2	$E_c - 0,05$	$E_c - 0,30$	$E_v + 0,11$	$E_v - 0,14$		0,25

Уровни дивакансии в германии

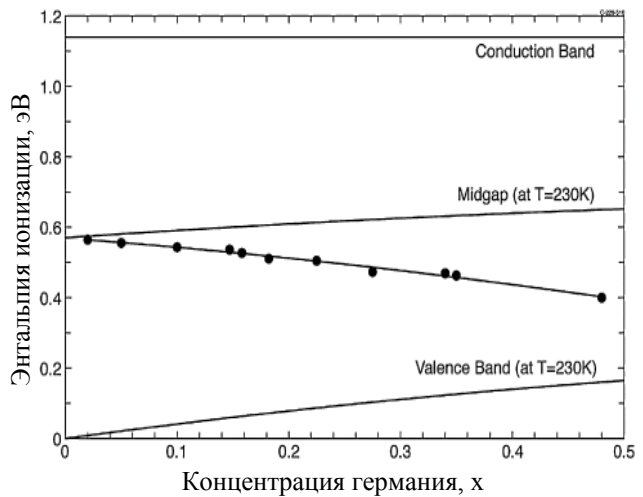
Показано, что в n-типе проводимости $Si_{1-x}Ge_x$ ($0 < x < 0,5$) дивакансии уменьшают энергетическое положение акцепторных уровней относительно дна зоны проводимости, а в р-типе относительно потолка валентной зоны за счет повышения энергии валентной зоны [16]. Это правило относится и к другим радиационным дефектам, которые подробно исследованы в работе [20], например к E-центрам.

На рис. 2 представлены результаты такого поведения акцепторных и донорных уровней дивакансии, полученные в работе [16]. Наблюдалось отсутствие непрерывности $\sim 0,07$ эВ в положении $V_2(-/0)$ уровня дивакансии, когда он пересекает середину запрещенной зоны, как можно видеть на рис. 2, б. После пересечения середины запрещенной зоны $Si_{1-x}Ge_x$ отрицательно заряженная и положительно заряженная дивакансии относительно дна зоны проводимости не изменяют своего положения при увеличении концентрации германия в кремнии. Все вышеизложенное позволяет определенно утверждать, что наблюдаемый разрыв $\sim 0,07$ эВ как раз и связан с конфигурационным переходом дивакансии из Q_1 в Q_2 конфигурацию. На рис. 2, а есть все основания предположить, что наблюдается нейтральный уровень $E_c - 0,53$ эВ дивакансии, которая из Q_1 конфигурации при определенной концентрации германия в кремнии переходит в Q_2 конфигурацию с нейтральным $E_c - 0,45$ эВ уровнем.

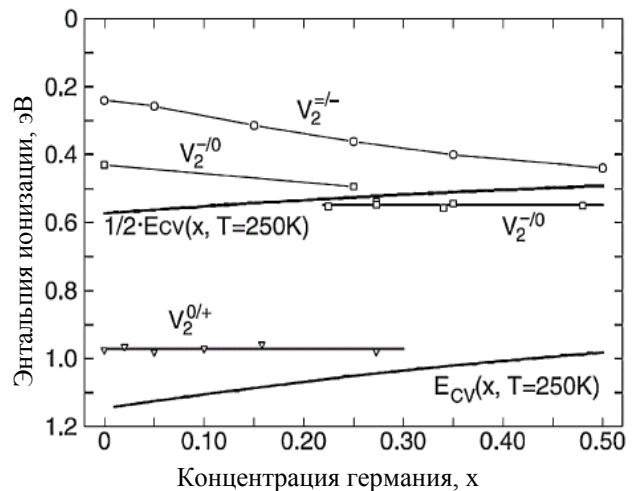
Зависимость ширины запрещенной зоны $Si_{1-x}Ge_x$ (E_g) от концентрации германия (x) в кремнии можно определить согласно выражениям [16]

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

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



а



б

Рис. 2. Энтальпия ионизации дивакансии в различных зарядовых состояниях: в нейтральном (а) и в отрицательно заряженных и положительном состоянии (б) относительно дна зоны проводимости $Si_{1-x}Ge_x$ в зависимости от концентрации германия (x) в кремнии [16].

При $\alpha = 4,9 \cdot 10^{-4}$ эВ/К, $\beta = 655$ К, $T = 300$ К, $x = 0,5$, тогда $E_g(x) = 0,9565$ эВ.

Определив положение в $Si_{1-x}Ge_x$ уровней дивакансии относительно потолка валентной зоны при $x = 0,5$ и учитывая повышение энергии валентной зоны при переходе к германию, получим положение уровней дивакансии в запрещенной зоне в Q_1 и Q_2 конфигурациях в монокристаллах германия. Уровни различных зарядовых состояний дивакансии в кремнии и германии в зависимости от конфигурации Q_1 или Q_2 представлены в табл. 1 соответственно.

Модификация уровней дивакансии в кремнии и германии

В работе [9] предложена схема уровней собственных радиационных дефектов, которая базируется не только на литературных данных. Она учитывает следующие положения: 1) радиационные дефекты создают дополнительные уровни энергии электронов в запрещенной зоне, причем собственные дефекты в кремнии амфотерны; 2) при захвате одного или второго электрона на

акцепторные уровни дивакансии или димежузлия положение их в запрещенной зоне кремния или германия изменяется на величину $\Delta E_0 = 0,165 \pm 0,005$ эВ, а в случае вакансий или межузлий – это значение удваивается; 3) 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. В табл. 2 и 3 представлены уровни дивакансии, модифицированные фоновыми примесями O_i и C_i . Исходя из того, что энергии Hubbard дивакансии в Q_1 и Q_2 конфигурациях в кремнии и германии соответственно равны и не зависят от числа захваченных электронов, можно предположить, что модификация дивакансии в германии в Q_1 конфигурации примесями O_i и C_i будет изменять энергетические уровни акцепторные и донорные на ту же величину, как и в кремнии.

Таблица 2. Уровни дивакансии в кремнии при модификации их фоновыми примесями, эВ

Зарядовое состояние	$V_2(Q_1)$	V_2C_i	V_2O_i	V_2CO_i	$V_2C_iI_{Si}$	I_{Si}	I_{2Si}
3-/2-	$E_c - 0,09$	$E_c + 0,01$	$E_c - 0,275$	$E_c - 0,17$	$E_c - 0,14$	$E_c - 0,04$	$E_c + 0,015$
2-/1-	$E_c - 0,261$	$E_c - 0,19$	$E_c - 0,38$	$E_c - 0,31$	$E_c - 0,31$	$E_c - 0,37$	$E_c - 0,15$
-/0	$E_c - 0,426$	$E_c - 0,39$	$E_c - 0,485$	$E_c - 0,45$	$E_c - 0,48$	$E_v + 0,42$	$E_c - 0,315$
0/0	$E_v + 0,53$	$E_v + 0,53$	$E_v + 0,53$	$E_v + 0,53$	$E_v + 0,53$	$E_v + 0,09$	$E_c - 0,48$
0/+	$E_v + 0,365$	$E_v + 0,33$	$E_v + 0,425$	$E_v + 0,39$	$E_v + 0,36$		$E_v + 0,475$
2+/+	$E_v + 0,21$	$E_v + 0,13$	$E_v + 0,32$	$E_v + 0,25$	$E_v + 0,19$		$E_v + 0,31$
E_H	0,165	0,20	0,105	0,14	0,17	0,33	0,165

Таблица 3. Уровни дивакансии в германии при модификации их фоновыми примесями, эВ

Зарядовое состояние	$V_2(Q_1)$	V_2C_i	V_2O_i	V_2CO_i	V_2CI_{Ge}	I_{Ge}	I_{2Ge}
3-/2-	$E_c - 0,25$	$E_c - 0,245$	$E_v + 0,235$	$E_c - 0,325$	$E_c - 0,235$	$E_c - 0,19$	$E_c - 0,135$
2-/1-	$E_v + 0,25$	$E_v + 0,32$	$E_v + 0,13$	$E_v + 0,20$	$E_v + 0,26$	$E_v + 0,14$	$E_c - 0,30$
-/0	$E_v + 0,085$	$E_v + 0,12$	$E_v + 0,025$	$E_v + 0,06$	$E_v + 0,09$		$E_v + 0,20$
0/0	$E_v - 0,08$	$E_v - 0,08$	$E_v - 0,08$	$E_v - 0,08$	$E_v - 0,08$		$E_v + 0,035$
E_H	0,165	0,20	0,105	0,14	0,17	0,33	0,165

Таблица 4. Уровни А центров в кремнии при модификации их фоновыми примесями, эВ

Зарядовое состояние	VO_i	VO_iI_{Si}	VO_iI_{2Si}	VO_iC_i	VO_iH	VO_iHI_2	VO_iP
2-/1-		$E_c + 0,06$	$E_c - 0,00$		$E_c + 0,075$	$E_c - 0,045$	
-/0	$E_c - 0,175$	$E_c - 0,205$	$E_c - 0,235$	$E_c - 0,14$	$E_c - 0,25$	$E_c - 0,31$	$E_c - 0,105$
0/0	$E_c - 0,47$	$E_c - 0,47$	$E_c - 0,47$	$E_c - 0,47$	$E_v + 0,545$	$E_v + 0,54$	$E_c - 0,47$
0/+	$E_v + 0,355$	$E_v + 0,385$	$E_v + 0,415$	$E_v + 0,32$	$E_v + 0,22$	$E_v + 0,28$	$E_v + 0,285$
2+/+	$E_v + 0,06$	$E_v + 0,12$	$E_v + 0,18$	$E_v - 0,01$		$E_v + 0,02$	
E_H	0,295	0,265	0,235	0,33	0,325	0,265	0,365

Таблица 5. Уровни А-центров в германии при модификации их фоновыми примесями, эВ

Зарядовое состояние	VO _i	VO _i I _{Ge}	VO _i I _{2Ge}	VO _i C	VO _i P	VO _i Cl _{Ge}
-/0	E _c - 0,20	E _c - 0,23	E _c - 0,26	E _c - 0,165	E _c - 0,13	E _c - 0,19
0/0	E _v + 0,17	E _v + 0,17	E _v + 0,17	E _v + 0,17	E _v + 0,17	E _v + 0,17
E _H	0,295	0,265	0,235	0,33	0,365	0,30

Модификация уровней А-центра в кремнии и германии

Следует внести еще некоторые уточнения в модель модификации радиационных дефектов, таких как дивакансия и А-центры в кремнии и германии. Присоединение межузельного атома кремния или германия понижает энергетическое положение акцепторного уровня А-центра на 0,03 эВ и повышает энергию донорного уровня на 0,03 эВ. В случае присоединения димежузлия к А-центру энергетическое положение его акцепторного уровня изменяется уже на 0,06 эВ аналогично модификации дивакансии атомом кислорода. Углерод модифицирует А-центры в кремнии и германии так же, как и дивакансии. В табл. 4 и 5 представлены уровни А-центров, модифицированные фоновыми примесями O_i и C_i.

Модификация уровней вакансии в кремнии и германии

При облучении ядерными частицами вакансии и межузельный атом могут находиться достаточно близко и образовать дефект, получивший название пара Френкеля. Вблизи вакансии I_{Si} или I_{Ge} создается давление до нескольких килобар на ближайшие от вакансии атомы и понижает энергетическое положение уровней на 0,03 - 0,09 эВ [8]. Если вакансия оказывается вблизи фоновых примесей кислорода или углерода в кремнии или германии, то ее энергетическое положение в запрещенной зоне изменяется согласно модели модификации радиационных дефектов фоновыми примесями [9]. В табл. 6 и 7 представлены уровни вакансии, модифицированные фоновыми примесями O_i и C_i в кремнии и германии.

Таблица 6. Модификация вакансии фоновыми примесями в кремнии, эВ

Зарядовое состояние	V	V-O _i	V-O _{2i}	V-O _i I _{Si}	V-I _{Si}	V-CO _i	VP
2-/-	E _c - 0,09	E _c - 0,21	E _c - 0,33	E _c - 0,27	E _c - 0,15	E _c - 0,14	E _c - 0,265
-/0	E _c - 0,42	E _c - 0,48	E _c - 0,54	E _c - 0,51	E _c - 0,45	E _c - 0,445	E _c - 0,46
0/0	E _v + 0,37	E _v + 0,37	E _v + 0,37	E _v + 0,37	E _v + 0,37	E _v + 0,37	E _v + 0,465
0/+	E _v + 0,04	E _v + 0,10	E _v + 0,16	E _v + 0,13	E _v + 0,07	E _v + 0,065	E _v + 0,27
E _H	0,33	0,27	0,21	0,24	0,30	0,305	0,195

Таблица 7. Модификация вакансии фоновыми примесями в германии, эВ

Зарядовое состояние	V	V-O _i	V-O _{2i}	V-O _i I _{Ge}	V-I _{Ge}	V-CO _i	VSb
3-/2-	E _c + 0,05	E _c - 0,13	E _c - 0,31	E _c - 0,22	E _c - 0,04	E _c - 0,03	E _c - 0,175
2-/-	E _c - 0,28	E _v + 0,26	E _v + 0,14	E _v + 0,20	E _v + 0,32	E _v + 0,33	E _c - 0,37
-/0	E _v + 0,05	E _v - 0,01	E _v - 0,07	E _v - 0,04	E _v + 0,02	E _v + 0,025	E _v + 0,10
E _H	0,33	0,27	0,21	0,24	0,30	0,305	0,195

Из табл. 6 и 7 видно, что вакансии в кремнии и германии, находясь только вблизи межузельного атома кислорода, и по зарядовому состоянию, и по энергетическим уровням в запрещенных зонах полупроводников отличаются от хорошо известных уровней А-центра. Если атом кислорода частично располагается в вакантном узле решетки, то энергия нейтрального уровня повышается на 0,1 эВ, а дефект получает название А-центр. В табл. 6 и 7 приводятся предполагаемые уровни пар Френкеля (V - I_{Si}) в кремнии и (V - I_{Ge}) в германии. Самым удивительным является появление уровня в положительно заряжен-

ном состоянии в кремнии E_v + 0,13 эВ, когда вакансия оказывается вблизи O_iI_{Si} дефекта.

Считается, что при облучении вакансии и межузельные атомы рождаются в нейтральном зарядовом состоянии. В р-Si вакансия существует в нулевом (0) или положительном зарядовом состоянии, а межузельный атом – в отрицательном или 0. Если образуется пара Френкеля, то в процессе облучения этот дефект может менять зарядовое состояние с положительного на отрицательный и таким образом мигрировать при сколь угодно низких температурах, согласно ионизационному механизму Bourgoin [22]. Пара

Френкеля, мигрируя по решетке кремния, захватывается на межузельный атом кислорода с образованием дефекта $E_v + 0,13$ эВ в положительно заряженном состоянии.

Обсуждение проблемы

Считается, что вакансия в кремнии – это дефект с отрицательной корреляционной энергией. Разница между энергией сжатия (E_{JT}) Яна - Теллера и энергией кулоновского взаимодействия между электронами определяет корреляционную энергию (η) [23] относительно потолка валентной зоны:

$$\eta = 2 \cdot E_{JT} - U.$$

В запрещенной зоне полупроводника образуются две полосы локализованных состояний, разделенные на величину внутриатомной энергии (энергия Hubbard или корреляционная энергия) [24]: $U = E_2 - E_1$. Здесь E_1 и E_2 – первая и вторая энергия ионизации радиационного центра. Моливер [25] показал, что $E_{JT} = 0,27$ эВ, а авторы [23], что $U = 0,25$ эВ. Таким образом, $\eta > 0$ и, следовательно, вакансия обладает отрицательной корреляционной энергией. При засветке светом $h\nu = 0,35$ эВ [10] при сколь угодно низких температурах электрон, возбужденный с энергией 0,35 эВ, из валентной зоны захватывается на уровень ($E_v + 0,29^{+/2+}$) эВ и понижает его энергию на $U = 0,25$ эВ, равной энергии взаимодействия захваченного электрона с собственными электронами дефекта. Тогда с помощью ЭПР-метода авторы [26] наблюдали уровень

($E_v + 0,04^{0/+}$) эВ в метастабильном состоянии, определенном как вакансия в положительно заряженном состоянии. Таким образом, уровень ($E_v + 0,29^{+/2+}$) эВ в кремнии является зеркальным отображением уровня ($E_v - 0,29^{+/2+}$) эВ, если бы вакансия была бы дефектом с положительной корреляционной энергией. Можно даже предположить, что межузельный атом кремния будет также дефектом с отрицательной корреляционной энергией, если будет доказано существование ($E_v + 0,24$) эВ уровня, принадлежащего I_{SI} ($0/+$).

Выводы

Приведены значения энергетических уровней дивакансии в кремнии и германии в разных конфигурациях. При модификации радиационных дефектов фоновыми примесями положение их нейтральных уровней в запрещенной зоне не изменяется. Энергия Hubbard является независимой от числа электронов на радиационном дефекте, а ее величина зависит от фоновых примесей вблизи вакансионного дефекта. Фоновые примеси модифицируют дивакансии в кремнии и германии только в Q_1 конфигурации с большей дисторсией решетки.

Показано, что у радиационных дефектов в германии отсутствуют донорные уровни, а энергия Hubbard у дефектов такая же, как и у радиационных дефектов в кремнии. Фоновые примеси изменяют акцепторные и донорные уровни радиационных дефектов в германии так же, как и в кремнии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Watkins G.D., Corbett J.W.* Defects in irradiated silicon. I. Electron spin resonance of the Si-A-center // *Phys. Rev.* - 1961. - Vol. 121, No. 4. - P. 1001 - 1014.
2. *Bemski G.* Paramagnetic resonance in electron irradiated silicon // *J. Appl. Phys.* - 1959. - Vol. 30, No. 8. - P. 1195 - 1198.
3. *Frens A.M. et al.* Observation of rapid direct charge transfer between deep defects silicon // *Phys. Rev. Lett.* - 1994. - Vol. 72, No. 18. - P. 2939 - 2942.
4. *Makarenko L.F.* Do we know the energy levels of radiation defects in silicon // *Physica B.* - 2001. - Vol. 308 - 310. - P. 465 - 469.
5. *Brotherton S.D., Bradley P.* Defect production and lifetime control in electron and γ -irradiation silicon // *J. Appl. Phys.* - 1982. - Vol. 53, No. 8. - P. 5720 - 5732.
6. *Моливер С.С.* Метод открытой оболочки для электронной структуры дивакансии кремния // *ФТТ.* - 1999. - Т. 41. - № 3. - С. 404 - 410.
7. *Долголенко А.П.* Электронные уровни конфигураций дивакансий в кремнии // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. "Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение"*. - 2012. - № 5(81). - С. 13 - 20.
8. *Емцев В.В., Машиовец Т.В., Михнович В.В.* Пары Френкеля в германии и кремнии // *ФТП.* - 1992. - Т. 26, вып. 1. - С. 22 - 44.
9. *Dolgolenko A.P., Litovchenko P.G., Varentsov M.D. et al.* Particularities of the formation of radiation defects in silicon with low and high concentration of oxygen // *Phys. Stat. Sol. (b).* - 2006. - Vol. 243, No. 8. - P. 1842 - 1852.
10. *Watkins G.D., Troxell J.R., Chatterjee A.P.* Vacancies and interstitials in silicon // *Defects and Radiation Effects in Semiconductors.* - 1978. Conf. Ser. № 46. - Bristol-London, 1979. - P. 16 - 30.
11. *Trueblood D.L.* Electron paramagnetic resonance in electron-irradiated Germanium // *Phys. Rev.* - 1963. - Vol. 161, No. 3. - P. 828 - 833.
12. *Pecheur P., Kauffer E., Gerl M.* Tight-binding study of the lattice vacancy in semiconductors // *Defects and Radiation Effects in Semiconductors.* - 1978. Conf. Ser. No 46. - Bristol-London, 1979. - P. 174 - 179.
13. *Mooney P.M., Poulin F., Bourgoin J.C.* Annealing of

- electron-induced defects in n-type germanium // Phys. Rev. B. - 1983. - Vol. 28, No. 6. - P. 3372 - 3377.
14. *Haller E.E.* Defects in Germanium: New results and novel methods // Int. Conf. on Radiation Physics of Semiconductors and Related Materials (Тбилиси, 1979). - Тбилиси: Изд-во Тбилисского ун-та, 1980. - С. 233 - 248.
 15. *Stein H.J.* Light-Sensitive defect formation by electron and neutron irradiation of n- and p-type Ge near 80 K // J. Appl. Phys. - 1972. - Vol. 43, No. 1. - P. 138 - 144.
 16. *Larsen A.N., Bro Hansen A., Mesli A.* Irradiation-induced defects in SiGe // Materials Science and Engineering B. - 2008. - Vol. 154 - 155. - P. 85 - 89.
 17. *Av Skardi H., Bro Hansen A., Mesli A., Larsen A.N.* The di-vacancy in particle-irradiated, strain-relaxed SiGe // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. - 2002. - Vol. 186. - P. 195 - 200.
 18. *Fage-Pedersen J., Larsen A.N., Mesli A.* Irradiation-induced defects in Ge studied by transient spectroscopies // Phys. Rev. B. - 2000-I. - Vol. 62, No. 15. - P. 10116 - 10125.
 19. *Емцев В.В., Машовец Т.В., Полоскин Д.С.* Проявление пар Френкеля в р-германии при низкотемпературном γ -облучении // ФТП. - 1991. - Т. 25, вып. 2. - С. 191 - 196.
 20. *Larsen Arne Nylandsted, Mesli Abdelmadjid.* The hidden secrets of the E-center in Si and Ge // Physica B. - 2007. - Vol. 401 - 402. - P. 85 - 90.
 21. *Poulin F., Bourgoin J.C.* Characteristics of the electron traps produced by electron irradiation in n-type germanium // Phys. Rev. B. - 1982. - Vol. 26, No. 12. - P. 6788 - 6794.
 22. *Bourgoin J., Corbett J.W.* A new mechanism for interstitial migration // Phys. Lett. - 1972. - Vol. 38A. - P.135 - 137.
 23. *Baraff G.A., Kane E.O., Schluter M.* Theory of the silicon vacancy: An Anderson negative-U system // Phys. Rev. B. - 1980. - Vol. 21, No. 12. - P. 5662 - 5686.
 24. *Hubbard J.* // Proc. Roy. Soc. A. - 1964. - Vol. 277. - P. 237.
 25. *Моливер С.С.* Конфигурационное вибронное смешивание для нейтральной вакансии в кремнии и алмазе // ФТТ. - 2000. - Т. 42, вып. 9. - С. 1590 - 1594.
 26. *Watkins G.D.* Lattice Vacancies and Interstitial in Silicon. // Chinese Journal of Physics. - 1977. - Vol.15, No. 2. - P. 92 - 101.

А. П. Долголенко

МОДИФІКАЦІЯ РАДІАЦІЙНИХ ДЕФЕКТІВ У КРЕМНІЙ І ГЕРМАНІЙ ФОНОВИМИ ДОМІШКАМИ

Запропоновано модель модифікації основних рівнів відомих радіаційних дефектів у кремнії і германії. Енергія Hubbard є незалежною від числа електронів на радіаційному дефекті, але її величина залежить від фонових домішок поблизу вакансійного дефекту. Якщо поблизу вакансійного дефекту розташоване міжвузля атома кисню, то енергія негативно зарядженого акцепторного дефекту знижується на 0,06 еВ, а донорного підвищується на цю ж величину. Міжвузля атома кремнію або германію змінює рівні дефекту на 0,03 еВ. Атом вуглецю в міжвузлі змінює енергію вакансійного дефекту на 0,035 еВ, але в протилежному напрямку. Модифікація вакансійних дефектів не змінює енергію нейтрального рівня дефекту в забороненій зоні кремнію та германію.

Ключові слова: кремній, германій, швидкі нейтрони, дивакансія.

A. P. Dolgolenko

MODIFICATION OF RADIATION DEFECTS IN Si AND Ge BY BACKGROUND IMPURITY

Model of modification of basic levels of the known radiation defects in silicon and a germanium is offered. Energy of Hubbard is independent of number of electrons on radiation defect, and its size depends on base-line admixtures near-by vacancy defect. If near-by vacancy defect of the interstitial atom of oxygen is located, then energy of the negatively-charged acceptor defect is reducing on 0.06 eV, and energy of donor rises on the same size. The interstitial atom of silicon and of germanium changes the levels of defect on 0.03 eV. The atom of carbon in the interstitial site changes energy of vacancy defect on 0.035 eV, but in opposite direction. Modification of vacancy defects does not change energy of neutral defect level in the band gap in silicon and germanium.

Keywords: silicon, germanium, fast neutron, divacancy.

Надійшла 01.07.2013

Received 01.07.2013