

## ДРЕЙФОВЫЕ БАРЬЕРЫ В ПОЛЕ ИК ПОДСВЕТКИ ОБЛУЧЕННОГО БЫСТРЫМИ НЕЙТРОНАМИ КРЕМНИЯ

А.П. Долголенко

Институт ядерных исследований НАН Украины,  
пр. Науки, 47, Киев, Украина, odolgolenko@kinr.kiev.ua

Рассчитана температурная зависимость дрейфовых барьеров в n-Si, измеренных в темноте и ИК подсветке за краем собственного поглощения Ge и Si фильтров. В рамках уточненной модели кластеров дефектов рассчитана температурная зависимость концентрации и подвижности электронов при их диффузном движении в высокоомном кремнии, выращенном методом бестигельной зонной плавки, после облучения быстрыми нейтронами реактора.

### Введение

В одном из фундаментальных исследований установлено, что быстрые нейтроны создают в кремнии кластеры дефектов, в которых дивакансии являются основными дефектами, стабильными при комнатной температуре [1]. В работе [2] методом молекулярных орбиталей подтверждено представление о двухъямном потенциале дивакансии в нейтральном и заряженном состоянии в кремнии. Другими авторами проведены эксперименты, в которых наблюдаются конфигурационные переходы дивакансии с большей дисторсии в меньшую и наоборот, а также приведены значения энергетических уровней дивакансии в Ge и Si в разных конфигурациях [3, 4]. Дивакансия как пятизарядный двухъямный центр подвержен эффекту Jahn-Teller с характерными электронными полосами инфракрасного поглощения [5] и фотопроводимости. В зависимости от зарядового состояния дивакансии ( $V_2$ ) в кремнии экспериментально наблюдались основные полосы поглощения:  $\lambda = 1.7$  мкм (0.73 эВ) дивакансии в нейтральном состоянии ( $V_2^0$ ) при 80 K 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 ИК - 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 [6]. Полоса  $\lambda = 3.9$  мкм (0.32 эВ) связана с фотовозбуждением  $V_2^+$  и экспериментальным наблюдением дырочной фотопроводимости [7].

### Эксперимент и результаты

В работе образцы n-Si ( $n_0 = 5.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ), выращенные методом бестигельной зонной плавки, исследовались после облучения  $3.85 \cdot 10^{12} \text{ н}^0 \text{ см}^{-2}$  флюенсом (Ф) быстрых нейтронов реактора. Облучение проводилось на горизонтальном канале реактора ВВР-М при комнатной температуре при потоке  $5 \cdot 10^8 \text{ н}^0 / \text{см}^2 \cdot \text{с}$ . Измерение удельной проводимости и постоянной Холла (в темноте и при подсветке инфракрасным светом) проводилось на крестообразных образцах с  $\sim 1$  и  $\sim 3$  % точностью 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 ИК света за краем собственного поглоще-

ния Ge и Si фильтров изменялась за счет их толщины в пределах (0.5 - 2) мм.

Экспериментальные результаты представлены на рис. 1, 2. На рис. 1 представлены температурные зависимости кинетических коэффициентов n-Si, измеренных в темноте и при ИК подсветке за краем собственного поглощения Ge и Si фильтров. Подвижность электронов при их диффузном движении в n-Si (рис. 2) описана с учетом температурной зависимости дрейфовых барьеров. В таблице представлены результаты расчета температурных зависимостей концентраций носителей: энергия и концентрация радиационных дефектов.

### Расчет кинетических коэффициентов в n-Si

Температурные зависимости эффективной концентрации электронов в n-Si, облученном быстрыми нейтронами, были вычислены в рамках уточненной модели Госсика [8]. Предполагалось, что каждый рассеянный быстрый нейтрон с вероятностью  $\Sigma = 0.15 \text{ см}^{-1}$  создает кластер дефектов со среднестатистическим размером  $R_1 = 7 \cdot 10^{-9}$  м. При вычислениях учитывалось с вероятностью  $\Sigma_1 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$  перекрытие областей пространственного заряда кластеров дефектов с помощью интеграла перекрытия [9], обусловленное перезарядкой радиационных дефектов.

Вычисленная концентрация дивакансий в различном зарядовом состоянии и их энергетическое положение в запрещенной зоне n-Si представлены в таблице, согласно проведенным измерениям в темноте и при подсветке ИК светом через Si и Ge фильтры толщиной 0,5 и 1 мм. Определено положение при  $T = 294$  K уровня Ферми в центре усредненного кластера  $\mu = E_c - 0.509$  эВ и протяженность  $R_2 = 6.72 \cdot 10^{-5}$  см пространственного заряда. Температурные зависимости подвижности электронов при измерении в темноте и при подсветке ИК светом через фильтры были вычислены в рамках теоретического описания диффузного движения электронов (рис. 1, 2) в проводящей матрице n-Si с учетом полученных температурных зависимостей дрейфовых барьеров. Температурные зависимости дрейфовых барьеров были вычислены в приближении, что  $\langle n \rangle / n$  есть только слабая функция дозы облучения быстрыми нейтронами реактора и не зависит от температуры измерения [10]. Холловская подвижность и удельная эффективная проводимость взаимосвязаны через эффективный коэффициент Холла [10] в рамках теории эффективной среды [11].

Величина дрейфового барьера и  $\langle n \rangle/n$  определялись при комнатной температуре; эффективный радиус кластеров дефектов в области температур максимальной эффективной проводимости, а проводимость кластеров подбиралась при низких температурах. И только тогда проводились вычисления температурных зависимостей дрейфовых барьеров (рис. 2).

сти, а проводимость кластеров подбиралась при низких температурах. И только тогда проводились вычисления температурных зависимостей дрейфовых барьеров (рис. 2).

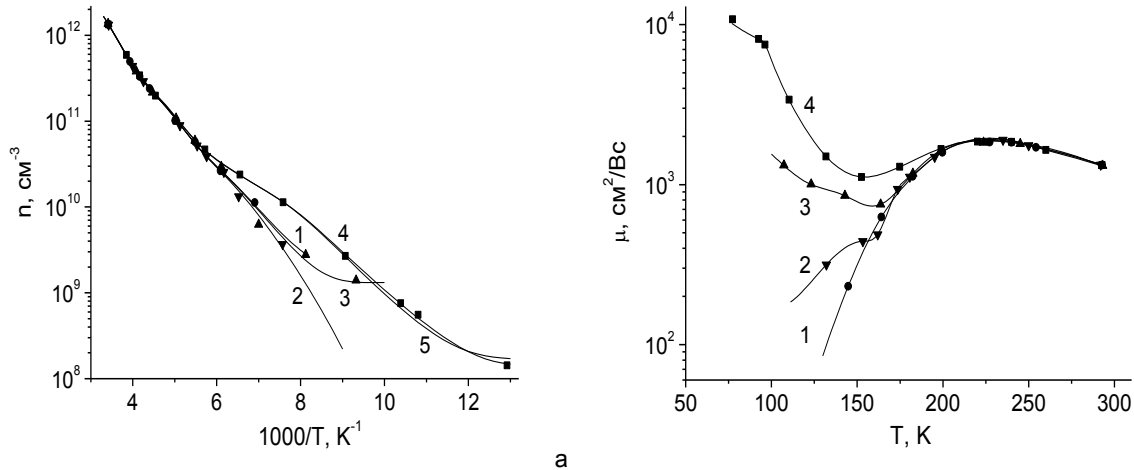


Рис. 1. Температурная зависимость эффективной концентрации (а) и подвижности (б) электронов ( $n_0 = 5.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ , Fz) в n-Si, облученном быстрыми нейтронами реактора флюенсом  $\Phi = 3.85 \cdot 10^{12} \text{ н}^0/\text{см}^2$  при измерении: 1 – в темноте; 2 – через Ge фильтр ( $h = 0.5 \text{ мм}$ ); 3 – через Si фильтр ( $h = 1.0 \text{ мм}$ ); 4 и 5 – через Si фильтр ( $h = 0.5 \text{ мм}$ ) при подсветке инфракрасным светом от глобара.  $\blacklozenge$  – экспериментальные значения; линии – расчет с учетом  $\Sigma_1 = 4 \cdot 10^{-4}$  и без учета (см. л. 5).

Таблица. 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 глобара.

$\Phi$ , $\text{н}^0/\text{см}^2$	$n_0$ , $\text{см}^{-3}$	$E_c - E_a$ , 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	$4.0 \cdot 10^{12}$	$2.0 \cdot 10^{12}$	$h = 0.5$
		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	$7.0 \cdot 10^{11}$	$6.92 \cdot 10^{11}$	

### Обсуждение

Известно, что  $E_c - 0.425 \text{ эВ}$  и  $E_c - 0.23 \text{ эВ}$  принадлежат дивакансии, причем концентрация  $V_2^{\square}$  в два раза больше наблюдаемой концентрации  $V_2^{2-}$  дивакансий. Такой уровень  $E_c - 0.23 \text{ эВ}$  дивакансии ( $V_2^{2-}$ ) можно экспериментально наблюдать только при её конфигурационной перестройке, если концентрация дивакансий ( $V_2^{2-}$ ) в конфигурации с большей дисторсией ( $Q_1$ ) в два раза больше с меньшей дисторсией ( $Q_2$ ). Тогда энергия уровня  $E_c - 0.23 \text{ эВ}$  равняется  $(0.26 \cdot 2/3 + 0.17 \cdot 1/3)$  [3]. Из таблицы 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, что кванты инфракрасного 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 [3] 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  $E_c - 0.425 \text{ эВ}$   $V_2^{\square}$  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  $\lambda = 1.3 \text{ мкм}$  ( $0.954 \text{ эВ}$ ) [12] возбуждают электроны из валентной зоны на уровень дивакансии ( $V_2^{2-}$ ) в  $Q_1$  конфигурации с большей дисторсией и заселенность  $E_c - 0.23 \text{ эВ}$  уровня уменьшается, а концентрация трижды

заряженной дивакансии [13]  $E_c - 0.09$  эВ растет. 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 эВ наблюдаются одновременно [5].

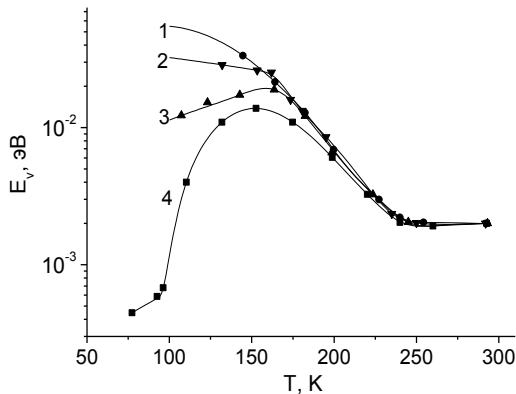


Рис. 2. Температурная зависимость дрейфовых барьеров в проводящей матрице в n-Si ( $n_0 = 5.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ , Fz), облученном быстрыми нейтронами реактора флюенсом  $\Phi = 3.85 \cdot 10^{12} \text{ н}^0 \text{ см}^{-2}$  при измерении: 1 – в темноте; 2 – через Ge фильтр ( $h = 0.5$  мм); 3 – через Si фильтр ( $h = 1.0$  мм); 4 – через Si фильтр ( $h = 0.5$  мм) при подсветке инфракрасным светом от глобара. ♦ - расчетные значения  $E_v$  при  $\langle n \rangle / n$ : 1 – 0.9315; 2 – 0.9326; 3 – 0.9337; 4 – 0.9361; линии – огибающие кривые.

Кванты ИК света  $\lambda = 1.8$  мкм (0.69 эВ) фотовозбуждают электроны из валентной зоны на уровень ( $V_2^{-/0}$ ) дивакансии, а  $\lambda = 3.6$  мкм (0.344 эВ) переводят их на возбужденный уровень ( $V_2^{2-/}$ ) дивакансии  $E_c - 0.065$  эВ. Кванты ИК света  $\lambda = 2.85$  мкм (0.435 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 проявляется уровень дивакансии, модифицированной углеродом  $E_c - 0.19$  эВ ( $CV_2^{2-/}$ ), а концентрация уровня  $E_c - 0.39$  эВ ( $CV_2^{-/0}$ ) только слегка уменьшается. Не исключено, что увеличение концентрации обобщенного уровня  $E_c - 0.23$  эВ дивакансии связано с фотовозбуждением конфигу-

рационного перехода дивакансии ( $V_2^{2-/}$ ) с большей дисторсии в меньшую дисторсию.

### Заключение

Рассчитаны в n-Si, облученном быстрыми нейтронами, кинетические коэффициенты после холловских измерений 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. Предполагается, что основными дефектами в кластерах являются дивакансии в конфигурации с большей дисторсией. Подсветка инфракрасным светом приводит к росту подвижности электронов, но и уменьшает перекрытие областей пространственного заряда кластеров дефектов.

### Список литературы

1. Watkins G.D., Corbett J.W. // Phys. Rev. 1965. V. 138. № 2A. P. 543. P. 555.
2. Моливер С.С. // ФТТ. 1999. Т. 41. № 3. С. 404-410.
3. Долголенко А.П. // Ядерная физика та енергетика. 2013. Т. 14. № 2. С. 163-171.
4. Долголенко А.П. // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 2013. № 5. С. 37-42.
5. Carton-Merlet F., Pajot B., Don D.T., Porte C., Clerjand B. and Mooney P.M. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1982. V. 15. P. 2239-2255.
6. Лаппо М.Т. и Ткачев В.Д. // ФТП. 1970. Т. 4. № 11. С. 2192-2195.
7. Войтенко В.А., Мальханов С.Е. // ЖЭТФ. 1997. Т. 112. В.2(8). С. 707.
8. Dolgolenko A.P., Fishchuk I.I. // Phys. Stat. Sol. (A). 1981. V. 67. P. 407.
9. Dolgolenko A.P., Litovchenko P.G., Varentsov M.D., Gaidar G.P., Litovchenko A.P. // Phys. Stat. Sol. (B). 2006. V. 243. № 8. P. 1842-1852.
10. Долголенко А.П. // Ядерная физика и атомная энергетика. 2011. Т. 12. № 2. С. 167-172.
11. Morrel H. Cohen and Joshua Jortner. // Phys. Rev. Lett. 1973. V. 30. № 15. P. 696 - 698.
12. Акулович Н.И., Петров В.В., Ткачев В.Д. // ФТП. 1976. Т. 10. № 6. С. 1038-1044.
13. Долголенко А.П. // Ядерная физика та енергетика. 2013. Т. 14. № 4. С. 377-383.

## DRIFT BARRIERS IN THE FIELD OF IR-ILLUMINATION N-SI IRRADIATED BY FAST NEUTRONS REACTOR

A.P. Dolgolenko

Institute for nuclear research of NAS of Ukraine, Prospect Nauky, 47, Kiev, Ukraine, odolgolenko@kinr.kiev.ua

The temperature dependence of the drift barriers in n-Si measured in the dark and under IR - illumination for the intrinsic absorption edge of Ge and Si filters was calculated. The behavior of the electron mobility in their diffusive motion in the high - resistance silicon grown by floating zone melting, after irradiation with fast neutrons reactor was described. In the framework of the improved model of defect clusters the calculation of temperature dependence of the electron concentration in silicon samples has been carried out. The temperature dependence of Pekar C.I. correction within the description of the electron mobility in silicon is using.