

ПЕРЕСТРОЙКА ДИВАКАНСИИ V_2 ($-I_0$) ПОД ВЛИЯНИЕМ УЛЬТРАЗВУКА

А.П. Долголенко

Институт ядерных исследований НАН Украины,
пр. Науки 47, 03680 Киев, Украина, odolgolenko@kinr.kiev.ua

Описана температурная зависимость концентрации электронов в облученных γ -квантами ^{60}Co кристаллах n -типа кремния, связанная с перезарядкой отрицательно заряженной дивакансии в процессе ее конфигурационной перестройки из одной конфигурации с большей дисторсией в конфигурацию с меньшей дисторсией. Обнаружено, что ультразвуковая обработка облученных γ -квантами образцов n -Si уменьшает вероятность конфигурационной перестройки дивакансии из одной конфигурации с большей дисторсией в конфигурацию с меньшей дисторсией.

Введение

Дивакансия, благодаря фундаментальным своим характеристикам [1], наиболее интенсивно изучалась в кремнии как экспериментально - облучением ядерными частицами, так и теоретически. В работе [2] определено, что при повышенных температурах для V_2^+ при 110 К и для V_2^- при 70 К скорость электронных прыжков между членами триплетных эквивалентных JT направлений дисторсии такая высокая, что дисторсия каждой конфигурации является динамично "усредненной", а эффективная симметрия увеличивается до D_{3d} . Авторы [3], обосновав теоретически, высказали возможность принципиально иметь оба V_2^{2-} (D_{3d}) и V_2^{2-} (C_{2h}) дефектные состояния в n -Si, облученного энергетическими частицами. При этом фонона - ассистлируемые переходы могут иметь место между этими двумя состояниями. Обнаружено влияние ультразвука на электрическую активность радиационных дефектов в кристаллах n -Si [4]. Моливер С.С. [5] ввел представление о двухъямном потенциале дивакансии в нейтральном и в заряженном состоянии и теоретически показал, что в кремнии дивакансия может находиться в конфигурации с большей и с меньшей дисторсией. Это позволило в работе [6] обосновать энергетические уровни дивакансии во второй конфигурации с меньшей Jahn-Teller дисторсией. В кремнии и германии рассмотрены эксперименты, которые можно объяснить как конфигурационные переходы дивакансии с большей дисторсии в меньшую [7]. Приведены значения энергетических уровней дивакансии в кремнии и германии в разных конфигурациях [8].

Цель работы — описать температурную зависимость концентрации носителей, связанную с перезарядкой в n -Si отрицательно заряженной дивакансии в процессе конфигурационного перехода из одной конфигурации в другую до и после воздействия ультразвука.

Статистика заполнения акцепторных состояний дивакансии в n -Si

Рассмотрим n -типа Si полупроводник, легированный атомами фосфора, с концентрацией N_d в области от комнатной температуры до температуры жидкого азота. Пусть имеются точечные дефекты акцепторного типа с концентрацией $N_a < N_d$. Будем n -Si считать невырожденным и некомпенсированным ($N_d < 10^{14} \text{ см}^{-3}$). Тогда будем иметь при повышении температуры образца

кремния от 77 К некоторую концентрацию электронов $n_i(T)$ в зоне проводимости за счет теплового возбуждения электронов с уровней E_a в n -Si. Дивакансия является многозарядным радиационным дефектом, который может находиться в конфигурации (Q_1) с большей дисторсией в кремнии с корреляционной энергией 0.165 эВ и в конфигурации (Q_2) с меньшей дисторсией с корреляционной энергией 0.25 эВ [6]. Представим, что дивакансии в n -Si являются основными радиационными дефектами с акцепторными уровнями в запрещенной зоне в первой конфигурации $E_{c-0.426}$ эВ и $E_{c-0.261}$ эВ и $E_{c-0.42}$ эВ и $E_{c-0.17}$ эВ во второй конфигурации. В зависимости от температуры они могут находиться в отрицательно заряженном или нейтральном состоянии.

Из условия электронейтральности [9] получим температурную зависимость концентрации электронов в образце n -Si:

$$n_i(T, E_a) = \frac{1}{2} (N_d - N_a - n_{11}(E_a)) \left(\sqrt{1 + \frac{4N_d n_{11}(E_a)}{(N_d - N_a - n_{11}(E_a))^2}} + 1 \right)$$

$$n_{11}(E_a) = g N_c(T) \exp \left(-\frac{E_a}{kT} \right) \quad (1)$$

где $g = 2$ – фактор вырождения акцепторного уровня в n -Si; N_a – концентрация акцепторных дефектов; $n_{11}(E_a)$ – концентрация электронов в зоне проводимости n -Si, когда уровень Ферми совпадает с уровнем E_a в проводящей матрице, N_d – концентрация доноров в образце.

В зависимости от энергетического положения уровней дивакансии в запрещенной зоне кремния их перезарядка в зависимости от температуры образца лежит в различных областях температурной шкалы. Тогда предположим, что в случае отсутствия статистического взаимодействия между уровнями радиационных дефектов концентрацию носителей в проводящей матрице n -Si можно определить, если вычислить суммарную концентрацию электронов $\sum_i n_i(T, E_i)$, которые

будут поставляться в зону проводимости при ионизации акцепторных уровней:

$$n(T) = \sum_i n_i(T, E_i) - N_d^i,$$

$$N_d^i = n_0 - N_a \quad (2)$$

где $i = 2$ - два акцепторных уровня дефектов присутствуют в проводящей матрице; n_0 - начальная концентрация электронов в n-Si; N_a - концентрация первого глубокого акцепторного уровня. При увеличении концентрации акцепторных уровней дефектов ($i > 2$) надо вычитать в уравнении (2) каждый раз концентрацию свободных доноров (N_d) при добавлении нового акцепторного дефекта (1).

Результаты математических вычислений

Моливер С.С. [5] теоретически показал, что в кремнии дивакансия может находиться в конфигурации с большей и с меньшей дисторсией. Экспериментально доказано [6], что дивакансии из атомной конфигурации в состоянии (Q_1) с большей дисторсией могут перестраиваться в конфигурацию с меньшей дисторсией (Q_2).

Предположим, что в результате облучения в образцы кремния n - типа вводятся одни дивакансии. Уровни различных зарядовых состояний дивакансии в кремнии в зависимости от конфигурации Q_1 и Q_2 представлены в [6].

Пусть N_1 - концентрация дивакансий в конфигурации (Q_1) с большей дисторсией и энергетическим положением в запрещенной зоне кремния относительно зоны проводимости (E_1), и N_2 - концентрация дивакансий в конфигурации (Q_2) с меньшей дисторсией и энергетическим положением в запрещенной зоне кремния относительно зоны проводимости (E_2). Считаем, что $E_1 < E_2$. Даже при комнатной температуре существует принципиальная возможность существования этим двум дефектным состояниям дивакансии [3]. В n-Si, облученном γ - квантами ^{60}Co , рассмотрим дивакансии (V_2^{+0}). Из таблицы 2 [6] видно, что энергетические положения дивакансий в запрещенной зоне n-Si в конфигурации Q_1 и Q_2 близки, и экспериментально должен наблюдаться обобщенный уровень с концентрацией ($N_1 + N_2$), в отсутствии конфигурационных переходов.

При температурах, при которых обычно проводятся измерения, время переориентации дивакансии [1] в n-Si значительно меньше времени перезарядки дефекта. Поэтому при понижении температуры дивакансия из конфигурации (Q_1), еще не захватив электрон на уровень E_1 , уже конвертировалась во вторую конфигурацию (Q_2), увеличив концентрацию дивакансий с уровнем E_2 . Тогда концентрация дивакансий в состоянии (Q_2) в n-Si равна:

$$N_v = N_2 + n_1(T, E_2). \quad (3)$$

Изменение в уравнении (1) концентрации дивакансий в состоянии (Q_1) в n-Si можно учесть:

$$N_v = N_1 - n_1(T, E_1). \quad (4)$$

Функция $n_1(T, E_i)$ определяется уравнением (1) с $N_d \leq N_a$. Скорость конфигурационного перехода дивакансии ($dn_1(T, E_i)/dT$) изменяет скорость и интервал перезарядки акцепторных уровней дивакансии, смещая его, согласно (3), в область комнатных температур и, согласно уравнению (4), в область температуры 77 К.

В экспериментальной работе [4] из температурной зависимости концентрации электронов в n-Si (Fz), облученном γ - квантами ^{60}Co определена концентрация $N = 1.3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ V_2^{+0} с уровнем $E_c - 0.424 \text{ эВ}$, а после ультразвуковой (УЗО) обработки ее концентрация $N_1 = 1.7 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ возросла. Естественно предположить, что в работе [4] наблюдался обобщенный уровень дивакансии V_2^{+0} . Предположим, что в образец кремния были введены дивакансии в конфигурации с большей дисторсией $E_c - 0.426 \text{ эВ}$ и с меньшей дисторсией $E_c - 0.42 \text{ эВ}$ с равными концентрациями N . В случае перехода дивакансии из конфигурации Q_1 в конфигурацию Q_2 полностью (1/1), без захвата электрона из зоны проводимости, наблюдается обобщенный уровень дивакансии V_2^{+0} с концентрацией $N = 1.3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (см. рис. 1а). Если частично (1/0.7), то наблюдается обобщенный уровень дивакансии V_2^{+0} с концентрацией $N_1 = 1.7 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (см. рис. 1б). Результаты вычислений обобщенного уровня отрицательно заряженной дивакансии V_2^{-0} в образце n-Si, облученном γ - квантами ^{60}Co , до и сразу после ультразвуковой (УЗО) обработки представлены в таблице 1.

Таким образом, после ультразвуковой (УЗО) обработки частичный переход нейтральной дивакансии из конфигурации $Q_1 \rightarrow Q_2$ привел к увеличению концентрации обобщенного уровня V_2^{+0} .

Как можно видеть на рис. 1а, кр. 1, наблюдается всплеск концентрации электронов в проводящей матрице n-Si (Fz) при полной конверсии $V_2(D_{3d})$ из Q_1 в Q_2 конверсию. Такой всплеск наблюдался в p-Si (Fz), облученном быстрыми нейтронами реактора [6, 7], свидетельствуя о переходе V_2^{+0} из конфигурации с большей дисторсией в меньшую дисторсию. Конверсия дивакансий происходила после захвата дырки на уровень $E_v + 0.365 \text{ эВ}$.

Таблица 1. Параметры расчета концентрации электронов в зоне проводимости в n-Si(Fz) ($n_0 = 4.8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) при наличии акцепторных уровней дивакансии V_2^{+0} в первой и во второй конфигурации в отношении 1,0 и обобщенного уровня $E_c - 0.424 \text{ эВ}$ дивакансии до и после ультразвуковой (УЗО) обработки

	$N_d \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$N_a \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$8n_a \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$8n_d \cdot 10^{-13}, \text{ см}^{-3}$	$E_c - E_a, \text{ эВ}$	Отношение концентраций
	6.1	1.3	-1.3	-1.3	0.426	$N_a^{(0.426/0.42)} = 1.0$
$\gamma - ^{60}\text{Co}$	4.8	1.3	+1.3		0.42	$8n_a / N_a = 1.0$
	4.8	1.3			0.424	
	5.7	1.3	-0.9	-0.9	0.426	
$\gamma - ^{60}\text{Co}$	4.4	1.3	+0.9		0.42	$N_a^{(0.426/0.42)} = 1.0$
УЗО	4.8	1.7			0.424	$8n_a / N_a = 0.7$

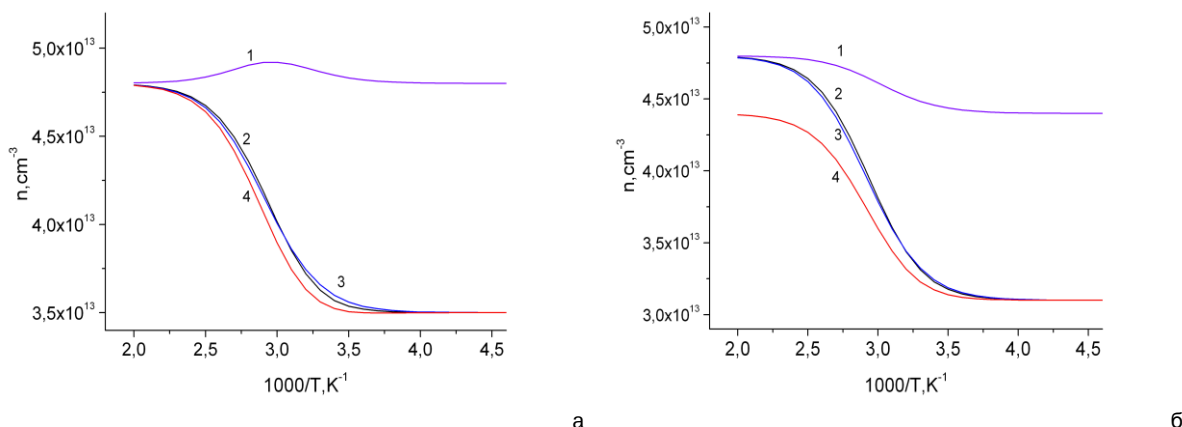


Рис. 1. Температурные зависимости концентрации электронов в n-Si ($n_0=4.8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) при наличии акцепторных уровней дивакансии в n-Si (Fz): 1 - $E_c-0.426 \text{ эВ}$; 2 - $E_c-0.426 \text{ эВ}$ и $E_c-0.42 \text{ эВ}$ дивакансии в Q_1 и Q_2 конфигурации; 3 - обобщенного $E_c-0.424 \text{ эВ}$ уровня $V_2^{-/0}$; 4 - $E_c-0.42 \text{ эВ}$. Вероятность конфигурационного перехода ($\Delta n_a / N_a$) дивакансии из первой конфигурации во вторую: а – 1,0; б – 0,7 (УЗО)

В n-Si (Fz) этот всплеск концентрации электронов в образце можно связать с высокой скоростью перехода из Q_1 в Q_2 конфигурацию по сравнению со скоростью захвата электрона на нейтральный уровень $E_c-0.261 \text{ эВ}$.

Заключение

Ультразвуковое воздействие на γ - ^{60}Co -облученные образцы n-Si(Fz) временно увеличило концентрации дивакансий с обобщенными уровнями $E_c-0.424 \text{ эВ}$ $V_2^{-/0}$.

Список литературы

1. Watkins G.D., Corbett J.W. Defects in irradiated silicon: Electron paramagnetic resonance of divacancy // Phys. Rev. 1965. V. 138, № 2A. P. 543-544; 555-560.
2. Sieverts E.G., Muller S.H. and Ammerlaan C.A.J. Divacancy in silicon: hyperfine interaction from electron-nuclear double-resonance measurements II // Phys. Rev. B. 1978. V. 18, № 12. P. 6834-6848.
3. Lindefelt U., Yong-Liang Wang. First- and second-nearest-neighbor divacancies in silicon: Origin and ordering of gap levels // Phys. Rev. B. 1988-II. V. 38, № 6. P. 4107-4112.

ing of gap levels // Phys. Rev. B. 1988-II. V. 38, № 6. P. 4107-4112.

4. Olikh Ya.M., Timochko N.D. and Dolgolenko A.P. Acoustic-wave-stimulated transformations of radiation defects in γ irradiated n-type silicon crystals // Technical Physics Letters. 2006. V. 32, № 7. P. 586-589.
5. Молывер С.С. Метод открытой оболочки для электронной структуры дивакансии кремния // ФТТ. 999. Т. 41. №3. С. 404-410.
6. Долголенко А.П. Электронные уровни конфигураций дивакансий в кремнии // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 2012. Т. 5(81). С. 13-20.
7. Долголенко А.П. Конфигурационные переходы дивакансий в кремнии и германии // Ядерная энергетика. 2013. Т. 14, № 2. С. 163-171.
8. Долголенко А.П. Электронные уровни конфигураций дивакансий в германии // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение» (87). 2013. №5. С. 37-42.
9. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М.: Изд-во «Наука», 1977. С. 672.

DIVACANCIES RESTRUCTURING $V_2^{-/0}$ UNDER THE INFLUENCE ULTRASOUND

A.P. Dolgolenko

Institute for nuclear research of NAS of Ukraine,
47 Nauky ave., 03680 Kyiv, Ukraine, odolgolenko@kinr.kiev.ua

The temperature dependence of the electron density in the crystals of n-type silicon irradiated γ - rays ^{60}Co associated with negatively charged divacancy in the process of restructuring of a configuration with more distortion in the configuration with less distortion described. In γ - rays irradiated samples n-Si the speed of adjustment divacancy from configuration with more distortion in the configuration with less distortion is determined as a function of energy and its recharge temperature. Ultrasonic treatment of n-type silicon crystals irradiated γ - rays ^{60}Co reduces the likelihood of divacancies configuration adjustment from one configuration with a greater distortion in configuration with less distortion was found.