

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ КОРРЕЛЯЦИЯ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В СЛАБОЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

Л.Ф.Макаренко

Белорусский государственный университет, 220050 Минск, пр. Скорины 4,
E-mail: makarenko@fpm.bsu.minsk.by

В настоящей работе представлены результаты исследований равновесной функции распределения электронов по уровням А-центра в кремнии n-типа, облученном гамма-квантами Co-60. Показано, что А-центры в кристаллах кремния, выращенных по методу Чохральского, не могут рассматриваться как изолированные одновалентные дефекты даже при их концентрации $\leq 10^{14}$ см⁻³, а объединены в далекие пары.

1. Введение

В настоящее время вопросы радиационной стойкости кристаллов кремния, с малым содержанием легирующих примесей приобрели практическое значение в связи с широким использованием прецизионных детекторов ядерных излучений на основе n-Si [1]. Для разработки таких детекторов с повышенной радиационной стойкостью требуется детальный учет всех факторов, влияющих на процессы образования и свойства радиационных дефектов и их комплексов.

Основное влияние на рабочие характеристики полупроводниковых детекторов излучений оказывают образующиеся при облучении центры рекомбинации-генерации. Недавно в [2] было показано, что в облученных кристаллах n-Si:O,C могут протекать рекомбинационные процессы, связанные с электронными переходами между радиационными дефектами, одним из которых является комплекс вакансия-кислород. Этот комплекс относится к основным электрически активным радиационным дефектам в кристаллах кремния n-типа с достаточно высоким содержанием кислорода, облученных гамма-квантами и электронами [3].

Для разработки прогностических моделей, описывающих поведение кремниевых детекторов в полях проникающей радиации, требуется выяснение механизма межцентровой рекомбинации. В частности, для реализации электронного перехода требуется достаточно малое расстояние между двумя центрами, что неизбежно должно влиять на функцию распределения носителей заряда по их уровням. В связи с этим целью настоящей работы является выяснение особенностей функции заполнения А-центра

2. Основная часть

2.1. Экспериментальные результаты

Исследовался монокристаллический кремний n-типа, выращенный по методу Чохральского, марки КЭФ-20. Концентрация носителей (n) составляла $2 \cdot 10^{14}$ см⁻³. Концентрация кислорода [O] и углерода [C] определялась из спектров ИК-поглощения и составляла [O] = $1 \cdot 10^{18}$ см⁻³, а углерода [C] = $5 \cdot 10^{16}$ см⁻³. Измерялись температурные зависимости коэффициента Холла ($T_{изм} \approx 78-320$ К). При расчете концентрации носителей учитывался Холл-фактор. Облучение гамма-квантами

Co-60 проводилось на установке Института прикладных физических проблем им. А.Н.Севченко.

Параметры дефекта определялись, используя метод наименьших квадратов.

Минимизировалась сумма

$$D(n) = \sum (n_{ical}/n_{iexp} - 1)^2 \quad (1)$$

где n_{iexp} - концентрация носителей заряда, измеренная при температуре n_{ical} - концентрация носителей заряда, рассчитанная либо из уравнения

$$N_{up} = n + N_1(n/(n + N_{C1})) + N_2(n/(n + N_{C2})) \quad (2)$$

либо из уравнения

$$N_{up} = n + N((2n^2 + nN_{C2})/(n^2 + nN_{C2} + N_{C1}N_{C2})), \quad (3)$$

где N_{up} - суммарная концентрация электронов на всех рассматриваемых уровнях, N , N_1 , N_2 - концентрации дефектов, вследствие ионизации которых происходит изменение концентрации носителей заряда в исследуемом интервале температур. Величина N_{Cj} представляет собой плотность состояний в зоне проводимости, приведенная к j-тому уровню дефекта E_j ,

$$N_{Cj} = N_c \exp(\Delta S_j/k) \exp(-(\Delta H_j/kT)), \quad (4)$$

где N_c - эффективная плотность состояний в c-зоне, $E_c - E_j = \Delta H_j - kT \Delta S_j$ - энергия ионизации j-того уровня, ΔS_j и ΔH_j - энтропия и энтальпия ионизации, k - постоянная Больцмана. Причем уравнение (2) применяется для случая когда происходит одновременное опустошение двух уровней, а (3) - когда ионизируется двухвалентный центр.

Анализ экспериментальных температурных зависимостей концентрации носителей заряда в облученном Cz-кремнии проводился, используя три различные модели. Модель I предполагала, что увеличение концентрации носителей с ростом температуры происходит вследствие ионизации одного простого глубокого дефекта ($N_1 = 0$, а $N_2 = 0$). В модели II предполагается наличие в запрещенной зоне двух независимых глубоких центров с близкими уровнями энергии. В модели III величина n рассчитывалась из уравнения (3). Искомыми (подгоночными) параметрами в модели I были N_{up} , $N_{up} - N_1$, ΔH_1 и ΔS_1 , в модели II - N_{up} , $N_{up} - N_1 - N_2$, $N_1 - N_2$, ΔH_1 , ΔS_1 , ΔH_2 и ΔS_2 , а в модели III - N_{up} , $N_{up} - N$, ΔH_1 , ΔS_1 , ΔH_2 и ΔS_2 . Минимизация суммы (1) проводилась, используя метод Левенберга-Марквардта, который, если сходится, является одним из самых эффективных для поиска минимума функции типа (1) [4]. Результаты обработки экспериментальных температурных зависимостей носителей заряда (ТЗКН) (Рис.1) в об-

лученных кристаллах Si приведены в Таблице. Как видно из Таблицы модель I является неудовлетворительной. Во-первых, она дает нереаль-

ные с физической точки зрения значения концентрации ионизации дефекта. Во-вторых, метры дефекта, определяемые

Таблица. Параметры дефектов, определенные из температурных зависимостей концентрации но (ТЗКН) в кристаллах n-Si, облученных гамма-квантами ^{60}Co , при различных схемах энергетических параметров дефекта.

Один изолированный дефект		Два изолированных дефекта		Один и двухвал
Полная ТЗКН	Высокотемпературная часть ТЗКН	Расчеты без ограничений	С ограничениями на энтропию Ионизации	Расчеты на
$\Delta H_1=0,143 \text{ эВ}$ $\Delta S_1=-2,5 \text{ кВ}$	$\Delta H_1=0,176 \text{ эВ}$ $\Delta S_1=-0,5 \text{ кВ}$	$\Delta H_1=0,328 \text{ эВ}$ $\Delta S_1=4,5 \text{ кВ}$	$\Delta H_1=0,186 \text{ эВ}$ $\Delta S_1=-0,3 \text{ кВ}$	ΔH
$N_1=1,12 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$	$N_1=1,01 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$	$\Delta H_2=0,145 \text{ эВ}$ $\Delta S_2=-2,1 \text{ кВ}$	$\Delta H_2=0,160 \text{ эВ}$ $\Delta S_2=-0,1 \text{ кВ}$	Δ
$\delta=0,0045$	$\delta=0,0009$	$N_1/N_2=0,15$	$N_1/N_2=0,5$	Δ
		$\delta=0,0012$	$\delta=0,0019$	δ

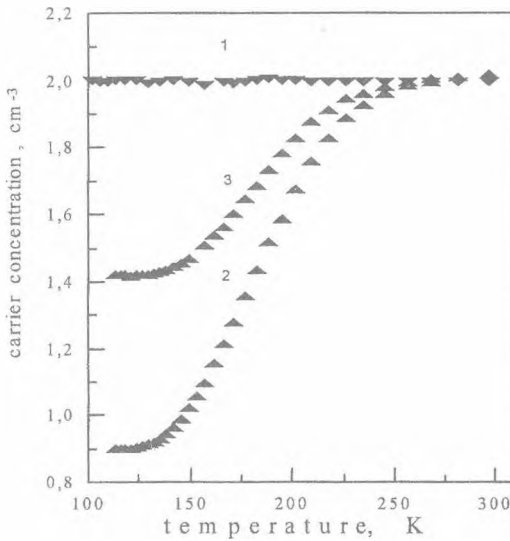


Рис.1. Типичные температурные зависимости концентрации носителей заряда ($n \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$), из которых определялись уровни комплекса кислород-вакансия в кремнии: до облучения - (1), после гамма-облучения и отжига при 575 K в течение 30 мин. - (2) и 150 мин. - (3).

ратурной части ТЗКН не совпадают с соответствующими значениями, рассчитанными из полной кривой. В-третьих, получаемая относительная среднеквадратичная погрешность определения концентрации превосходит величину, рассчитанную для исходного образца, что видно из сравнения Рис.2а и Рис.2б.

Значительно лучшее качество подгонки может быть достигнуто для модели II. Однако и она тоже должна быть отвергнута, исходя из физического смысла полученных результатов. Если проводить минимизацию без ограничений, то оптимальные значения величин ΔH и ΔS далеки от физических разумных значений по крайней мере для одного из дефектов. Если же наложить ограничения на энтропию ионизации ΔS , предполагая, как обычно, что $-0,7 \text{ кВ} < \Delta S < 0,7 \text{ кВ}$, то мы получим сравнимые концентрации двух независимых дефектов

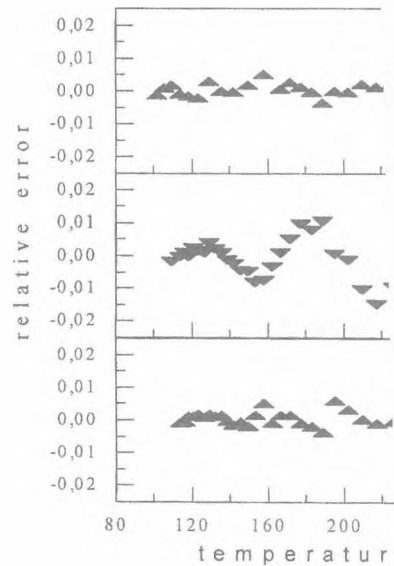


Рис.2. Погрешность измерения концентрации заряда, рассчитанная для кривых: (а) - на Рис.1 по одноуровневой модели, (б) - модели двухвалентного центра

Однако, одновременное обра- облучении гамма-квантами двух дефектов, имеющих близкие скорости, не подтверждается ни данными отжига радиационных поврежде- данными емкостных измерений модель II не может быть принята - является наиболее приемлемой. С точностью описывает функцию исследуемого центра (см. Таблицу) противоречит другим данным.

2.2. Обсуждение

Возможны два объяснения по- результатов. Это документ has been edited with Infix PDF Editor. free for non-commercial use. To remove this notice, visit: www.iceni.com/unlock.htm

приведенный в [6], такое предположение не противоречит имеющимся экспериментальным данным. Однако для объяснения неизменности концентрации носителей при $T=300$ К в процессе облучения следует предположить, что одновременно с А-центром с практически той же скоростью должен образовываться еще один акцепторный дефект с глубоким уровнем, который к тому же отжигается полностью идентично А-центру. Как показывает опыт исследования радиационных дефектов в кремнии, такая ситуация не может быть реализована. Поэтому гипотезу о том, что А-центр является двухвалентным центром с близкими уровнями, следует признать маловероятной.

Второе объяснение полученных экспериментальных данных может быть дано на основании предположения о коррелированном пространственном распределении образующихся вакансионных комплексов. В этом случае близкую пару А-центров (A_2) будем рассматривать как новый комплекс, имеющих три зарядовых состояния A_2^+ , A_2^0 , A_2^- . Если обозначить уровень изолированного центра как E_1 , то он будет соответствовать отрыву электрона от комплекса A_2^- . Отрыву электрона от A_2^+ соответствует уровень E_1 . Его положение зависит от корреляционной энергии кулоновского отталкивания электронов, находящихся на каждом из центров пары, а также может зависеть от энергии их упругого взаимодействия (U_{el}): $E_2 = E_1 + U_0 + U_{el} = E_1 + U_{eff}$. Функция заполнения такой пары будет идентична функции заполнения двухвалентного дефекта. Если расстояние между двумя А-центрами достаточно велико, то величина U_{eff} будет мала, как и наблюдается на опыте.

Для кристаллов кремния, приготовленных различным образом доля комплексов, связанных в пары и величина U_{eff} могут, вообще говоря, изменяться.

Таким образом, можно сделать вывод, что комплекс кислород-вакансия в кремнии, выращенном по методу Чохральского, не может быть охарактеризован как изолированный дефект с фиксированными значениями энтропии и энтальпии ионизации. Этот вывод подтверждается и данными других работ, посвященных холловским и емкостным исследованиям радиационных дефектов в кристаллах Si, содержащих кислород.

Наиболее часто цитируемым значением для уровня А-центра является величина $\Delta E_A = E - E(-/0) = 0.160 - 1.1 \cdot 10^{-4} T$ эВ [3]. В то же при измерениях ΔE_A в сильно компенсированных образцах получают значения ΔE_A в интервале 0.18÷0.20 эВ [7].

ΔE_A , определенные емкостными методами также имеют разброс в интервале 0.15÷0.19 эВ [1,6]. Причем более высокие значения получаются в кремниевых детекторах излучений, которые, как известно, характеризуются очень малым содержанием примесей. Наиболее вероятно образование пар происходит вследствие действия внутренних источников напряжений. Такими источниками напряжений могут быть различные несовершенства решетки: точечные центры [8], их комплексы, кислородные преципитаты [9]. Эти центры приводят к наличию в решетке внутренних сил, действующих на подвижные дефекты и примеси.

3. Заключение

В работе проведено исследование функции заполнения комплекса кислород-вакансия в кристаллах кремния n-типа, выращенных по методу Чохральского о облученного гамма-квантами Co-60. Показано, что даже при концентрациях комплекса $\leq 10^{14} \text{ см}^{-3}$ его функция заполнения не может быть описана в рамках модели изолированных дефектов. Для корректного описания экспериментальных данных необходимо учитывать объединение А-центров в пары. Термообработка при $T \approx 600^\circ \text{C}$ изменяет характеристики пространственной корреляции пар. Предполагается, что спаривание А-центров связано с наличием поля внутренних напряжений в кристаллической решетке кремния, возникающих в результате образования термических дефектов

Список литературы

1. Вербичкая Е.М. и др. // Физ. Техн. полупроводн.-1991.- т.27, в.2.- С.205
2. Frens A.M., et al. // Phys. Rev. Lett., -1994,- в.72, N 18.- P.2939.
3. Емцев В.В., Машовец Т.В. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках.- М.: Радио и Связь, 1981.- С. 248.
4. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование: пер. с англ., М: Мир, 1975, 534 с.
5. Makarenko L.F. // Sem. Sci. Technol.- 1993.- в. 8, N8.- P.1692.
6. Komarov B.A., Sopryakov V.I. // Phys. Stat. Solidi.- 1981.- в. A66, N 2.- P. 783.
7. Витовский Н.А. и др. // Физ твердого тела.- 1962.- т.4, в.10.- С. 2845.
8. Davies G. et al. // Phys/ Rev. B.- 1991.-v.44, N 22.- P.12146.
9. Рейви К. Дефекты и примеси в полупроводниковом кремнии.- М.: Мир, 1984.- С.471.

SPATIAL CORRELATION OF RADIATION DEFECTS IN LIGHTLY DOPED SILICON CRYSTALS

L.F.Makarenko

Belarus State University, F. Scaryna Ave. 4, 220050 Minsk, BELARUS

E-mail: makarenko@fpm.bsu.minsk.by

Hall-effect measurements at temperatures 78÷300 K have been performed in Czochralski-grown crystals irradiated with Co-60 gamma-rays. Using least-square procedure the distribution of electrons among energy levels of the oxygen-vacancy complex (A-center) have been investigated.

It has been shown that A-center cannot be considered as a single-level isolated point defect. In as-grown crystals A-centers are coupled in pairs. Spatial correlation of A-centers is suggested to be due to local strain field caused by structural imperfections.