

## ФИЗИКА РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ И ЯВЛЕНИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

УДК 621.315.592.3:546.28:539.12.04

### РОЛЬ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ КРЕМНИЯ В КОНФИГУРАЦИОННОЙ ПЕРЕСТРОЙКЕ ДИВАКАНСИЙ В КЛАСТЕРАХ ДЕФЕКТОВ

А.П. Долголенко

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев, Украина

E-mail: odolgolenko@kinr.kiev.ua

Описано поведение подвижности электронов при их диффузном движении в высокоомном кремнии, выращенном методом бестигельной зонной плавки (Fz) и методом Чохральского (Cz), после облучения быстрыми нейтронами реактора и последующего отжига при комнатной температуре. В рамках уточненной модели кластеров дефектов рассчитана температурная зависимость концентрации электронов в образцах кремния. Определены энергетические уровни радиационных дефектов в проводящей матрице n-Si. Обоснована роль межузельных атомов кремния в гистерезисе температурной зависимости подвижности электронов и их участие в конфигурационной перестройке дивакансий в кластерах дефектов.

#### ВВЕДЕНИЕ

Кластеры дефектов, созданные в полупроводниках быстрыми нейтронами реактора, характеризуются высокой концентрацией дефектов, значительной протяженностью у них пространственного заряда, и вследствие этого они сильно влияют на кинетические коэффициенты, в частности, на подвижность носителей в кремнии, изменяя проводимость образцов.

К числу наиболее изученных собственных дефектов в кремнии можно отнести дивакансию ( $V_2$ ). В кремнии с решеткой типа алмаза дивакансии создают по шесть оборванных связей, являются амфотерными центрами и могут находиться в четырех или в пяти зарядовых состояниях в зависимости от их конфигураций.

Автор [1] методом молекулярных орбиталей подтвердил результаты, полученные ранее методом функционала плотности, и ввел представление о двухъямном потенциале дивакансии в нейтральном и заряженном состояниях в кремнии.

В кремнии лучше всего изучены точечные дефекты (вакансии и межузельные атомы), а также их комплексы с атомами примеси. Одной из наиболее важных характеристик дефектов является энергия миграции. Так, авторы [2] сравнивали энергии миграции межузельного атома ( $I_{Si}$ ) и пары Френкеля относительно энергии миграции вакансии ( $V^{++}$ , 0,33;  $V^0$ , 0,45;  $V^-$ , 0,18 эВ), измеренные Воткинсом [3]. При этом были использованы молекулы водорода ( $H_2$ ) в качестве стоков вакансий и межузельных атомов кремния, созданных облучением 6 МэВ электронами. Было показано, что энергия I и I-V миграции ( $E_m$ ) почти не отличается от энергии миграции вакансий в соответствующих зарядовых состояниях. Исследование отжига кластеров дефектов (основными дефектами в них являются дивакансии и тривакансионные дефекты) позволило определить энергии активации их аннигиляции с межузельными и

димерузельными атомами кремния:  $E_a^I = 0,91$  эВ и  $E_a^{I_2} = 0,74$  эВ соответственно [4]. Зная величину барьера ( $E_b = 0,41$  эВ) [5], были определены энергии их миграции  $E_1^m = 0,5$  эВ и  $E_{I_2}^m = 0,33$  эВ при температуре  $\sim 100$  °С.

Таким образом, и вакансии, и межузельный атом кремния в решетке кристалла могут двигаться только активационным способом, а энергия миграции зависит не только от зарядового состояния, но и от локализации дефекта в решетке.

Цель работы: на примерах экспериментального измерения температурного поведения подвижности электронов в кремнии, выращенного различными методами, показать роль межузельных атомов кремния в конфигурационной перестройке дивакансий в кластерах дефектов.

#### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В данной работе исследовались образцы n-Si ( $n_0 = 5,6 \cdot 10^{12}$  см<sup>-3</sup>), выращенные методом Чохральского, и образцы n-Si ( $n_0 = 1,56 \cdot 10^{14}$  см<sup>-3</sup>), выращенные методом бестигельной зонной плавки, после облучения  $3 \cdot 10^{12}$  и  $3 \cdot 10^{13}$  н<sup>0</sup>см<sup>-2</sup> флюенсами (Ф) быстрых нейтронов реактора соответственно. Облучение проводилось на горизонтальном канале реактора ВВР-М при комнатной температуре и потоке  $5 \cdot 10^8$  н<sup>0</sup>(см<sup>2</sup>·с). Поток быстрых нейтронов с точностью  $\sim 10\%$  был определен пороговым детектором <sup>32</sup>S (пороговая энергия  $E = 0,95$  МэВ) и приведен к энергии нейтронов начиная с  $\sim 100$  кэВ согласно теоретическому спектру нейтронов. Измерения проводимости и коэффициента Холла были выполнены стандартным компенсационным методом с точностью  $\sim 1$  и  $\sim 3\%$  соответственно. Образцы n-Si измерялись после выдержки различное время при комнатной температуре с понижением и обратным повышением температуры на образце в процессе измерения.

На рис. 1–3 показаны температурные зависимости кинетических коэффициентов n-Si, облученного быстрыми нейтронами реактора после отжига при комнатной температуре. В табл. 2 и 3 представлены результаты расчетов температурных зависимостей концентраций носителей (энергии и концентрации радиационных дефектов) в проводящей матрице образцов. Расчет концентрации носителей выполнен в рамках уточненной модели Госсика.

### ТЕОРИЯ

Известно, что быстрые нейтроны образуют в кремнии наряду с точечными дефектами и их скопления, окруженные областями пространственного заряда. Свойства полупроводников с кластерами дефектов в качественном отношении отличаются от свойств тех же материалов с равномерно введенными простыми дефектами [6]. Известно, что кластеры дефектов равновероятно вводятся быстрыми нейтронами, поэтому геометрическое перекрытие учитывается экспоненциальным способом. Но с понижением температуры образца надо учитывать дополнительное перекрытие областей пространственного заряда кластеров дефектов [7].

Дополнительное перекрытие кластеров дефектов, обусловленное перезарядкой всех введенных точечных дефектов, можно учесть с помощью интеграла перекрытия (8):

$$f = f_0 \exp(-\Sigma_1 V \Phi), \quad (1)$$

где  $\Sigma_1$  – вероятность перекрытия кластеров дефектов,  $\text{см}^{-1}$ ;  $f_0$  – доля объема, занятого кластерами дефектов, причём учитывается только геометрическое перекрытие объемов (V) кластеров дефектов, обусловленное статистическим законом взаимодействия быстрых нейтронов с атомами кристалла.

Так как процесс накопления изолирующего объема кластеров дефектов аналогичен закону накопления и распада радиоактивных ядер, то доля объема, занятого кластерами дефектов, равна

$$f = (1 - \exp(-\Sigma V \Phi)) \cdot \exp(-\Sigma_1 V \Phi). \quad (2)$$

Вероятность дополнительного перекрытия областей пространственного заряда кластеров значительно меньше вероятности образования кластеров дефектов:  $\Sigma_1 \ll \Sigma$ . Исходя из уточненной модели Госсика для объема [9], получаем эффективную концентрацию носителей ( $n_{эф}$ ) в зависимости от флюенса и температуры [10]:

$$n_{эф}(T, \Phi) = n(T, \Phi) \exp \left[ -\frac{4\pi\epsilon\epsilon_0 \Sigma R_1 \Phi}{N_2(T, \Phi) q^2} \left( \mu - kT \ln \frac{N_c(T)}{N_2(T, \Phi)} \right) \right], \quad (3)$$

где  $N_2(T, \Phi)$  – концентрация экранирующих центров в областях пространственного заряда кластеров дефектов;  $\mu$  – положение уровня Ферми в центре кластера относительно разрешенных зон кремния;  $N_c(T)$  – эффективная плотность состояний в зонах;  $n(T, \Phi)$  – концентрация носителей в проводящей

матрице кремния;  $R_1$  – средний радиус областей скопления дефектов;  $\epsilon$  и  $\epsilon_0$  – диэлектрические постоянные материала и вакуума соответственно;  $q$  – заряд носителя тока.

С увеличением уровня легирования n-Si уровень Ферми в кластере можно определить:

$$\mu = E_c - 0,6 + 0,033 \log(n_0/n_1), \quad (4)$$

где  $n_0$  – концентрация электронов в зоне проводимости n-Si до облучения,  $\text{см}^{-3}$ ;  $n_1 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$  – концентрация носителей в собственном кремнии.

При повышении температуры образца от 77 К будем иметь некоторую концентрацию электронов в зоне проводимости за счет теплового возбуждения (ионизации) электронов с уровня  $E_a$  как в проводящей матрице  $n(T, \Phi)$ , так и в областях пространственных зарядов кластеров дефектов  $N_2(T, \Phi)$ :

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

$$n_{11} = g N_c(T) \exp \left( -\frac{E_a}{\lambda kT} \right), \quad (5)$$

где  $g = 2$  – фактор вырождения акцепторного уровня;  $N_a(\Phi)$  – концентрация радиационно-введенных акцепторных дефектов после облучения флюенсом  $\Phi$ ;  $n_{11}$  – концентрация электронов в зоне проводимости n-Si, когда уровень Ферми совпадает с уровнем  $E_a$  в проводящей матрице или с эффективным уровнем  $E_a/\lambda$  в пространственно-заряженной области кластера дефектов.

Если акцепторный дефект находится в проводящей матрице, то  $\lambda = 1$ , а в случае его локализации в области пространственного заряда кластера  $\lambda = 1,5$ .

### ОБСУЖДЕНИЕ

При облучении полупроводников быстрыми нейтронами атомам решетки передается минимальная энергия ( $> 4,7$  кэВ), достаточная для образования областей с каскадами смещенных атомов в n-Si. После атермической перестройки вакансии объединяются в дивакансии, тривакансии и тетравакансии, а после релаксации решетки межузельные атомы кремния оказываются в потенциальных ямах глубиной 0,41 эВ. В проводящей матрице образца n-Si образуются кластеры дефектов, окруженные областями пространственных зарядов, с высокой концентрацией дивакансий. Моливер С.С. [1] показал, что в кремнии дивакансия является дефектом с двухъямным потенциалом и может находиться в конфигурации с большей и меньшей дисторсиями. Перестройка дивакансий из одной конфигурации в другую приводит к изменению корреляционной энергии уровней в запрещенной зоне кремния (табл. 1).

Энергетическое положение уровней дивакансии и их зарядовое состояние в кремнии в зависимости от атомной конфигурации, где  $\Delta E$  – корреляционная энергия

Атомная конфигурация	$E_c - E_a$ , эВ		$E_v + E_d$ , эВ		$\Delta E$ , эВ
	=/-	-/0	0/+	0/0	
$D_{3d}$	0,261	0,426	0,365	0,53	0,165
$C_{2h}$	0,17	0,42	0,20	0,45	0,25

Расчеты в рамках уточненной модели Госсика [9] показали, что при понижении температуры образца n-Si уровень Ферми в проводящей матрице смещается ко дну зоны проводимости, длина дебаевского экранирования уменьшается, а высота потенциального барьера кластера растет. Акцепторные дефекты в областях пространственного заряда кластеров частично перезаряжаются, что уменьшает экранирующий эффект положительно заряженных доноров и приводит к дополнительному перекрытию кластеров дефектов. К геометрическому перекрытию кластеров дефектов прибавляется дополнительное перекрытие их областей пространственного заряда. Обычно при этом наблюдается уменьшение подвижности электронов в проводящей матрице из-за роста высоты дрейфовых барьеров [11]. В собственном кремнии

уровень Ферми находится на нейтральном уровне дивакансии, и с увеличением уровня легирования смещается ко дну зоны проводимости (4).

Если в кластерах уровень Ферми закреплен между уровнями дивакансии в нейтральном и заряженном состояниях, то в проводящей матрице уровень Ферми при понижении температуры смещается ко дну зоны проводимости.

В проводящей матрице образца n-Si при комнатной температуре длина свободного пробега электрона не больше 350 Å, а длина дебаевского экранирования около 5400 Å. При движении в проводящей матрице под действием электрического поля электроны диффузно огибают области пространственного заряда, преодолевая дрейфовые барьеры.

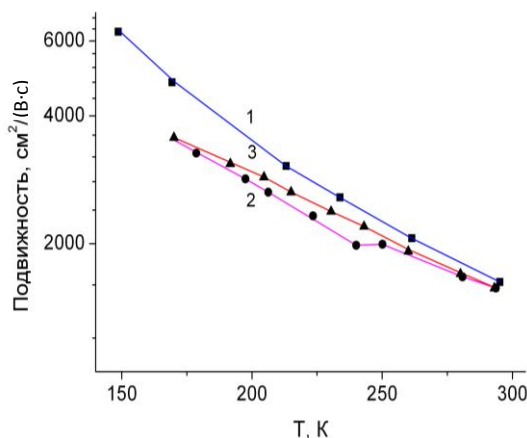
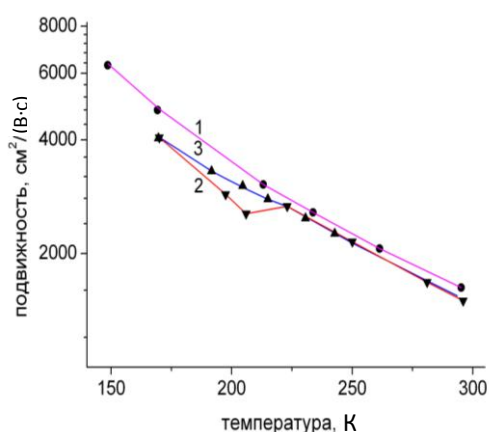


Рис. 1. Температурные зависимости подвижности электронов в n-Si ( $Fz$ ), измеренные на образце с концентрацией носителей до облучения  $n_0 = 1,56 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , который облучен быстрыми нейтронами ( $n^\circ$ ) флюенсами  $2,7 \cdot 10^{13} \text{ н}^\circ \cdot \text{см}^{-2}$  (слева) и  $3,0 \cdot 10^{13} \text{ н}^\circ \cdot \text{см}^{-2}$  (справа). Кривая 2 снята с понижением, а кривая 3 с обратным повышением температуры

С увеличением дозы облучения большее количество дивакансий уже при более высокой температуре и измерении получают возможность конфигурационной перестройки. Происходит относительное понижение высоты дрейфовых барьеров и рост подвижности электронов (см. рис. 1).

При понижении температуры образца дивакансиям энергетически выгодно в кремнии занимать более глубокую потенциальную яму. Электроны из зоны проводимости при понижении температуры захватываются не только на отрицательные уровни дивакансий, но и на акцепторный уровень межузельного атома кремния. Поэтому энергия активации движения  $I_{Si}$  уменьшается и, преодолев барьер, атом перемещается из кластера. Деформация решетки вокруг дивакансий в кластере понижается, и они из конфигурации с большей дисторсией переходят в конфигурацию с меньшей дисторсией. Захват элект-

тронов на уровень дивакансии  $V_2^{-0}$  в  $Q_1$ - или  $Q_2$ -конфигурации определяется положением уровня Ферми. Если дивакансии в кластере в  $Q_1$ -конфигурации, то положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости равно  $E_c - 0,5075$  эВ и  $E_c - 0,545$  эВ в  $Q_2$ -конфигурации. Поэтому, когда при понижении температуры дивакансии в кластере меняют конфигурацию, то электроны из зоны проводимости не могут захватиться на  $E_c - 0,42$  эВ-уровень дивакансии в  $Q_2$ -конфигурации. Тогда незахваченные электроны в проводящей матрице понижают дрейфовые барьеры, и подвижность электронов растет (см. рис. 1, кривая 2). При повышении температуры образца вероятность захвата электронов на отрицательный уровень дивакансии мала, и кривая подвижности электронов лежит выше (см. рис. 1, кривая 3).

Результаты расчета температурных зависимостей кинетических коэффициентов в образцах n-Si, облученных флюенсами быстрых нейтронов реактора, приведены в табл. 2. Расчет температурной зависимости концентрации носителей в проводящей матрице образца проводился в рамках уточненной модели Госсика согласно уравнению (5).

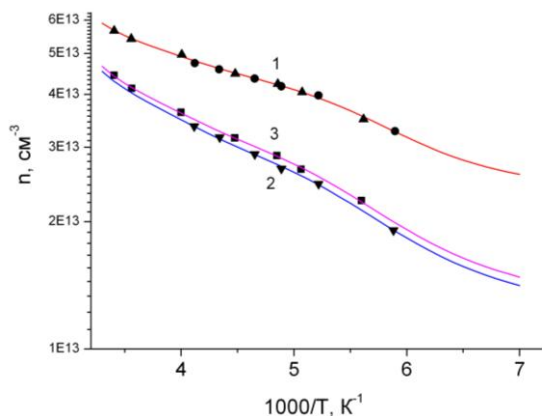


Рис. 2. Температурные зависимости концентрации электронов в n-Si ( $Fz$ ), которые измерены на образце с концентрацией носителей до облучения  $n_0=1,56 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , облученном ( $n^\circ$ ) флюенсами  $2,7 \cdot 10^{13}$  и  $3,0 \cdot 10^{13} \text{ н}^\circ \cdot \text{см}^{-2}$ . Кривая 3 снята с понижением и кривая 2 с обратным повышением температуры, а кривая 1 снята с понижением и с обратным повышением температуры

На рис. 2, как показали вычисления температурной зависимости концентрации носителей, кривые 2 и 3 отличаются только положением уровня Ферми на  $\mu = 0,02$  эВ в среднестатистическом кластере дефектов. Тогда можно показать, что  $\sim 30\%$  дивакансий в конфигурации с большей дисторсией изменили свою конфигурацию при понижении температуры образца n-Si.

В работе [4] предложена схема уровней собственных радиационных дефектов, которая базируется не только на литературных данных. Она учитывает следующие положения: (j) радиационные дефекты создают дополнительные уровни энергии электронов в запрещенной зоне, причем собственные дефекты в кремнии амфотерны; (jj) при захвате одного или второго электрона на акцепторные уровни дивакансии или димеждоузлия положение их в запрещенной зоне кремния изменяется на величину  $\Delta E_0 = (0,165 \pm 0,005)$  эВ, а в случае вакансий или междоузлий – это значение удваивается; (jjj) 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 [4]. Энергии Hubbard дивакансии в  $Q_1$ - и

$Q_2$ -конфигурациях в Si и Ge соответственно равны и не зависят от числа захваченных электронов. Исходя из этого, можно предположить, что модификация дивакансии в германии в  $Q_1$ -конфигурации примесями  $O_i$  и  $C_i$  будет изменять акцепторные и донорные энергетические уровни на те же самые величины, как и в кремнии [12]. Следует внести еще некоторые уточнения в модель модификации радиационных дефектов, таких как дивакансия и А-центры. Присоединение междоузельного атома кремния понижает энергетическое положение А-центра акцепторного уровня на 0,03 эВ и повышает энергию донорного уровня на 0,03 эВ. В случае присоединения димеждоузлия к А-центру относительное энергетическое положение в запрещенной зоне кремния акцепторного уровня дефекта изменяется уже на 0,06 эВ, аналогично модификации дивакансии атомом кислорода. Углерод модифицирует А-центры так же, как и дивакансии.

На основе вышеизложенного можно предположить, что уровень  $E_c-0,455$  эВ принадлежит дивакансии модифицированной междоузельным атомом кремния (табл. 2), а  $E_c-0,39$  эВ- и  $E_c-0,19$  эВ-уровни принадлежат дивакансии, модифицированной углеродом, и они находятся соответственно в однократно и в двукратнозаряженном отрицательном состоянии. Возможно уровень  $E_c-0,205$  эВ – это А-центр, модифицированный междоузельным атомом кремния.

Высокая концентрация кислорода в исследованных образцах способствует увеличению концентрации междоузельных дефектов как в проводящем объеме, так и в кластерах дефектов. Согласно [13] в образцах Cz-Si и Si<Ge> кислород препятствует выходу на поверхность междоузельных атомов Si, а также, возможно, является центром, на котором образуется димеждоузельный дефект, когда в одном междоузлии они удерживаются только потенциальным рельефом кристалла.

Междоузельные атомы кремния ( $I_{Si}$ ) увеличивают деформацию решетки около дивакансий в кластере. При выдержке образцов при комнатной температуре  $I_{Si}$  уже не уходят на стоки, в том числе и на поверхность образца. Такое старение n-Si (Cz) при комнатной температуре приводит не только к модификации дивакансий междоузельными атомами Si, но и к аннигиляции с ними.

На рис. 3 видно, что с увеличением времени выдержки при температуре 292 К конфигурационная перестройка дивакансий происходит при более низкой температуре. Но при выдержки 20 ч наблюдается сильное уменьшение подвижности электронов (см. рис. 3, кривая 3). Предположим, что в кластерах произошли модификации дивакансий междоузельными атомами Si. Тогда возросла вероятность захвата электронов на уровень  $E_c-0,455$  эВ дефекта  $V_2I_{Si}$  в кластерах, усилилось перекрытие пространственных зарядок кластеров, и дрейфовые барьеры возросли.

Таблица 2

Параметры расчёта концентрации ( $N_a$ ) и энергетического положения уровней ( $E_a$ ) в проводящей матрице n-Si (Fz) после облучения различными дозами быстрых нейтронов реактора ( $\Phi$ );  
 $t$  – время изотермического отжига образцов при комнатной температуре

$\Phi \cdot 10^{-13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$	$n_0 \cdot 10^{-14} \text{ см}^{-3}$	$E_c - E_a, \text{ эВ}$	$N_d \cdot 10^{-13} \text{ см}^{-3}$	$N_a \cdot 10^{-13} \text{ см}^{-3}$	$t, \text{ ч}$
2,7	1,55	0,455	15,5	8,05	5
–	–	0,39	7,45	1,0	–
–	–	0,205	6,45	1,0	–
–	–	0,19	5,45	1,0	–
3,0	1,56	0,455	15,6	9,7	5
–	–	0,39	5,9	0,7	–
–	–	0,205	5,2	1,5	–
–	–	0,19	3,7	0,7	–

$N_d$  – концентрация экранирующих центров вне нарушенной области кластеров дефектов среднего радиуса  $R_1 = 50 \text{ \AA}$ .

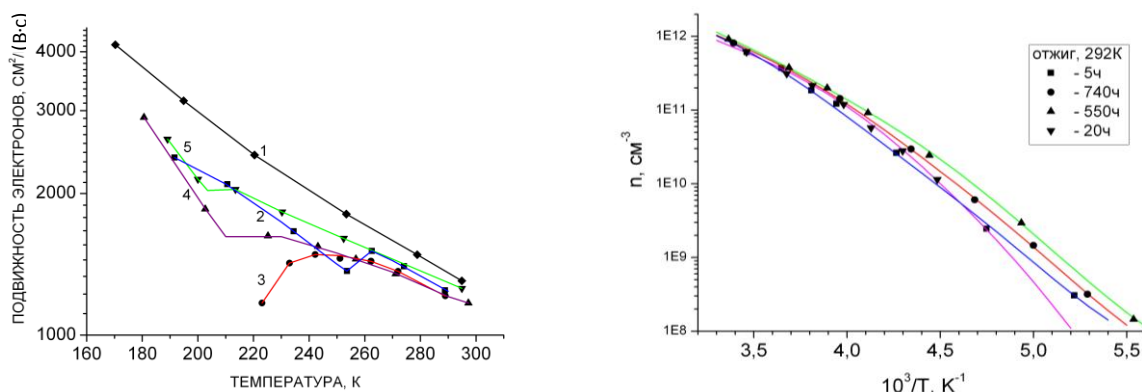


Рис. 3. Температурные зависимости подвижности и концентрации электронов в n-Si (Cz), измеренные на образце с концентрацией носителей до облучения  $n_0 = 5,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ , который облучен n-флюенсом  $5,4 \cdot 10^{12} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ . Кривые измерены: 1 – до облучения и после выдержки образца при температуре 292 K в течение времени: 2 – 5; 3 – 20; 4 – 550; 5 – 740 ч

Таблица 3

Параметры расчёта концентрации ( $N_a$ ) и энергетического положения ( $E_a$ ) уровней в проводящей матрице n-Si (Cz) после облучения и изотермического отжига образцов при комнатной температуре в течение времени  $t, \text{ ч}$

$\Phi \cdot 10^{-12} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$	$n_0 \cdot 10^{-12} \text{ см}^{-3}$	$E_c - E_a, \text{ эВ}$	$N_d \cdot 10^{-12} \text{ см}^{-3}$	$N_a \cdot 10^{-12} \text{ см}^{-3}$	$t, \text{ ч}$
5,4	5,6	0,51	5,6	2,3	5
		0,425	3,3	3,27	–
		0,51	5,6	3,2	20
		0,425	2,4	1,2	–
		0,39	1,2	1,3	–
		0,51	5,6	0,6	550
		0,455	5,0	2,75	–
		0,425	2,25	1,0	–
		0,39	1,25	1,227	–
		0,51	5,6	2,1	740
		0,455	3,5	0,1	–
0,425	3,4	2,8	–		
0,39	0,6	0,58	–		

Характер температурной зависимости концентрации электронов  $n(T)$  (см. рис. 3) в проводящей матрице свидетельствует, что отжиг n-Si (Cz) при комнатной температуре не изменяет суммарную концентрацию дефектов вакансионного типа. Результаты расчетов температурных зависимостей кинетических коэффициентов в образце, представ-

ленные в табл. 3, показывают суммарную концентрацию  $\sim 5,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$  дефектов независимо от времени отжига. При этом при уменьшении концентрации уровня  $E_c - 0,425 \text{ эВ } V_2^{2/-}$  увеличивается концентрация уровня  $E_c - 0,51 \text{ эВ}$  или  $E_c - 0,455 \text{ эВ}$ . Образование более мелкого уровня  $E_c - 0,39 \text{ эВ } (V_2C_i^{2/-})$  с концентрацией  $\sim 0,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$  и дивакансии в кластерах

из конфигурации с большей дисторсией переходят в конфигурацию с меньшей дисторсией при температуре на  $\sim 50$  К ниже. Предполагается идентичность поведения вакансионного типа дефектов как в кластерах дефектов, так и в проводящей матрице.

Самое интересное поведение уровня  $E_c - 0,51$  эВ: концентрация то растёт, то уменьшается, то снова растёт. Электроны из зоны проводимости при понижении температуры захватываются на нейтральный уровень дивакансии, и энергия уровня смещается на величину энергии Hubbard.

Экспериментально показано [14], 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. Дивакансия может находиться в конфигурации с большей дисторсией в сильном деформационном поле, создаваемом межузельными атомами кремния ( $I_{Si}$ ) не только в кластерах дефектов, но и в проводящей матрице.

При понижении температуры образца дивакансии, тем не менее, энергетически выгодно в кремнии занимать более глубокую потенциальную яму. При захвате электрона энергия нейтрального уровня повысится только на  $0,165$  эВ. При теоретическом описании экспериментальной температурной зависимости концентрации электронов выявится уровень  $E_c - 0,51$  эВ, который можно определить только в проводящей матрице образцов кремния.

## ВЫВОДЫ

Предложена модель поведения межузельных атомов кремния в кластерах дефектов, которая объясняет температурную зависимость подвижности электронов при измерении эффекта Холла с понижением и обратным повышением температуры образцов кремния, выращенных различными методами. Модель основывается на уменьшении энергии миграции  $I_{Si}$  при захвате электрона на акцепторный уровень  $E_c - 0,37$  эВ межузельного атома кремния. Показано, что  $\sim 30\%$  дивакансий в конфигурации с большей дисторсией изменили свою конфигурацию при понижении температуры образца n-Si (З.П.). Предложено объяснение, почему уровень  $E_c - 0,51$  эВ следует приписать дивакансии.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. С.С. Моливер. Метод открытой оболочки для электронной структуры дивакансии кремния // *ФТТ*. 1999, т. 41, №3, с. 404-410.
2. M. Suezawa, Y. Takada, T. Tamano, R. Taniguchi, F. Hori, and R. Oshima. Migration energies of point defects during electron irradiation of hydrogenated Si crystals // *Phys. Rev. B*. 2002, v. 66, p. 155201 (6 p.).
3. G.D. Watkins, J.R. Troxell, A.P. Chatterjee. Vacancies and interstitials in silicon // *Proc. Intern. Conf.*

*“Defects and Radiation Effects in Semiconductors”*. Ser. N 46 (Nice, 1978). Inst. of Phys. Bristol and London, 1979, p. 16-30.

4. М.Д. Варенцов, Г.П. Гайдар, А.П. Долголенко, П.Г. Литовченко. Радиационная стойкость кремния, легированного германием, с высокой концентрацией свободного кислорода // *Ядерная физика та енергетика (Nuclear Physics and Atomic Energy)*. 2006, №1(17), с. 60-66.

5. В.Л. Винецкий, Г.А. Холодарь. *Радиационная физика полупроводников*: Монография. К.: «Наукова думка». 1979, 336 с.

6. Н.А. Ухин. Модель разупорядоченных областей в кремнии, созданных быстрыми нейтронами // *ФТП*. 1972, т. 6, №5, с. 931-934.

7. А.П. Долголенко. Подвижность носителей в случае диффузного движения при конфигурационной перестройке дивакансий в кремнии // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2014, №4(92), с. 38-43.

8. А.П. Долголенко, Г.П. Гайдар, М.Д. Варенцов, П.Г. Литовченко. Радиационная стойкость n- и p-Si, легированных кислородом и германием, при облучении высокоэнергетическими ядерными частицами // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2009, №2(93), с. 151-157.

9. B.R. Gossick. Disordered Regions in Semiconductors Bombarded by Fast Neutrons // *J. Appl. Phys.* 1959, v. 30, N 8, p. 1214-1218.

10. А.П. Долголенко. Variation of Carrier Removal Rate with Irradiation Dose in Fast-Pile Neutron Irradiated n-Si // *Phys. Stat. Sol. (a)*. 2000, v. 179, p. 179-188.

11. А.П. Долголенко. Диффузное и дрейфовое движение электронов в n-типе кремния, облученного быстрыми нейтронами реактора // *Ядерная физика и атомная энергетика (12)*. 2011, №2, с. 167-172.

12. А.П. Долголенко. Электронные уровни конфигураций дивакансий в германии // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение» (87)*. 2013, №5, с. 37-42.

13. А.П. Долголенко, П.Г. Литовченко, М.Д. Варенцов, Г.П. Гайдар, А.П. Литовченко. Особенности образования радиационных дефектов в кремнии с низкой и высокой концентрацией свободного кислорода // *Збірник наукових праць Інститута ядерних досліджень*. 2005, №2(15), с. 106-114.

14. А.П. Долголенко. Электронные уровни конфигураций дивакансий в кремнии // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение» (81)*. 2012, №5, с. 13-20.

Статья поступила в редакцию 14.03.2016 г.

## **РОЛЬ МІЖВУЗЛОВИХ АТОМІВ КРЕМНІЮ В КОНФІГУРАЦІЙНІЙ ПЕРЕБУДОВІ ДИВАКАНСІЙ В КЛАСТЕРАХ ДЕФЕКТІВ**

*О.П. Долголенко*

Описано поведінку рухливості електронів при їх дифузному русі в високоомному кремнії, який вирощено методом безтигельного зонного плавлення (Fz) і методом Чохральського (Cz), після опромінення швидкими нейтронами реактора і наступного відпалу при кімнатній температурі. У рамках уточненої моделі кластерів дефектів розрахована температурна залежність концентрації електронів у зразках n-Si. Визначено енергетичні рівні радіаційних дефектів у провідній матриці кремнію. Обґрунтовано роль міжвузлових атомів кремнію в гістерезисі температурної залежності рухливості електронів і їх участь у конфігураційній перебудові дивакансій в кластерах дефектів.

## **ROLE OF INTERSTITIAL SILICON ATOMS IN THE CONFIGURATION RESTRUCTURING DIVACANCIES IN THE DEFECT CLUSTERS**

*A.P. Dolgolenko*

The behavior of the mobility of electrons as they diffuse movement in the high-resistivity silicon, grown by floating zone melting (Fz) and Czochralski (Cz), after irradiation with fast neutrons reactor and subsequent annealing at room temperature was described. As part of the revised model of defect clusters was calculated temperature dependence of the electrons density in the conductive matrix of silicon samples n-type. The energy levels of radiation defects in n-Si defined. It is substantiates the role of interstitial silicon atoms in the hysteresis of the temperature dependence of the electron mobility and their participation in the restructuring of the configuration divacancy defects in clusters.