## Эффект поля и электрическая емкость кристаллов кремния при прыжковой проводимости по точечным радиационным дефектам, "локализующим" уровень Ферми

© Н.А. Поклонский<sup>¶</sup>, С.А. Вырко, А.Г. Забродский\*

Белорусский государственный университет, 22030 Минск, Республика Беларусь \* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 12 марта 2007 г. Принята к печати 3 апреля 2007 г.)

Проведен расчет статического эффекта поля и электрической емкости кристаллов кремния при прыжковой проводимости по дефектам в зарядовых состояниях (+1), (0) и (-1), "локализующим" уровень Ферми. В запрещенной зоне кремния дефекты в зарядовых состояниях (0) и (+1) формируют v'-зону, а в зарядовых состояниях (-1) и (0) формируют c'-зону. Ширина энергетических c'- и v'-зон рассчитывается в предположении кулоновского взаимодействия каждого заряженного дефекта только с ближайшим по расстоянию ионом. Величина энергетической щели между c'- и v'-зонами дефектов полагается постоянной. Предсказывается немонотонность зависимости емкости и поверхностной прыжковой проводимости от электрического потенциала на поверхности сильнодефектных кристаллов кремния.

PACS: 72.10.Fk, 72.20.Ee, 72.80.Cw

### 1. Введение

Воздействуя ионизирующим излучением (радиацией), можно управлять свойствами полупроводниковых материалов без изменения их атомного состава, что важно при создании функциональных элементов электроники [1]. Метод "легирования" полупроводников устойчивыми радиационными дефектами имеет определенное преимущество по сравнению с металлургическим легированием [2], потому что позволяет вводить в большой концентрации дефекты с глубокими энергетическими уровнями в запрещенной зоне (энергетической щели).

Экспериментально установлено, что во многих элементарных полупроводниках и полупроводниковых соединениях под действием ионизирующего излучения (уквантов, электронов, быстрых реакторных нейтронов) и частичного термического отжига создаются достаточно устойчивые (в области температур функционирования полупроводниковых приборов) радиационные дефекты [3]. При этом уровень Ферми смещается с ростом флюенса радиации к предельному положению в запрещенной зоне (реже  $E_{\rm F}$  смещается в зону проводимости (с) или валентную зону (v)). Это предельное положение уровня Ферми является характеристикой кристаллического полупроводника [4-6]. Стабилизация уровня Ферми определяется накоплением собственных радиационных дефектов (вакансий, межузельных атомов и их ассоциатов). Дефекты одного типа (сорта), которые могут находиться в трех зарядовых состояниях (+1, 0, -1), самодостаточны для обеспечения электрической нейтральности кристалла. В литературе обсуждаются особенности температурных зависимостей емкости и электропроводности сильнодефектных кристаллов кремния [7], однако количественное их описание практически не проводилось.

Цель данной работы — рассчитать квазистатическую емкость и поверхностную проводимость (эффект поля) слабо компенсированного кремния с прыжковой миграцией электронов по радиационным дефектам решетки. Рассматривается сильнодефектный кристаллический кремний, содержащий собственные точечные двухуровневые дефекты одного сорта (типа) в такой концентрации, что они стабилизируют уровень Ферми Е<sub>F</sub>. Для таких кристаллов характерна слабая зависимость E<sub>F</sub> как от температуры, так и от концентрации примесных атомов. Дефекты, находящиеся в зарядовых состояниях (+1) и (0), формируют v'-зону с энергетическими уровнями  $E_1$ , а в зарядовых состояниях (0) и (-1) формируют с'-зону в запрещенной зоне кремния (энергетические уровни  $E_2$ ), расположенную ближе к *с*-зоне, чем v'-зона (см. рис. 1). Прыжковый перенос электронов осуществляется между дефектами в зарядовых состояниях (-1) и (0), а также в зарядовых состояниях (0) и (+1).

### 2. Статистика заполнения дефектов электронами и прыжковые токи в *c'*- и *v'*-зонах

Рассмотрим кремний в условиях только прыжковой миграции электронов по неподвижным радиационным дефектам. Суммарная концентрация дефектов —  $N = N_0 + N_{-1} + N_{+1}$ , где  $N_0$ ,  $N_{-1}$ ,  $N_{+1}$  — концентрации дефектов в зарядовых состояниях (0), (-1) и (+1).

<sup>¶</sup> E-mail: poklonski@bsu.by



**Рис. 1.** Одноэлектронная энергия *E* как функция координаты *x* в полупроводнике с точечными радиационными дефектами:  $E_{\mu}$  — уровень подвижности электронов зоны проводимости,  $E_{\rm F}^{(v)} < 0$  — уровень Ферми в запрещенной зоне, отсчитанный от порога подвижности дырок,  $\overline{E}_2 - \overline{E}_1 = E'_g$  — ширина энергетической щели между c'- и v'-зонами. Стрелками показаны прыжки электронов по c'-, v'-зонам и генерационно-рекомбинационные переходы электронов между ними.  $Z_d$ ,  $Z_a$  — зарядовые состояния мелких водородоподобных доноров и акцепторов.

Условие электронейтральности имеет вид

$$N_{-1} = N_{+1} + Z_c K N, \tag{1}$$

где K — степень компенсации радиационных дефектов мелкими водородоподобными донорами или акцепторами, KN — концентрация атомов компенсирующей примеси, полностью находящихся в зарядовом состоянии  $Z_c$ . При компенсации радиационных дефектов в кремнии атомами фосфора  $Z_c = +1$ , при компенсации атомами бора  $Z_c = -1$ .

Согласно [8,9], концентрации прыгающих по дефектам электронов в v'- и c'-зонах есть  $N_{h1} = N_0 N_{+1}/N$  и  $N_{h2} = N_{-1} N_0/N$ . Считаем, что прыжковые подвижности  $M_{h1}$  и  $M_{h2}$  электронов в зонах радиационных дефектов приблизительно равны.

Концентрации ионизованных и нейтральных дефектов с учетом энергетических плотностей состояний  $g_1 = g_1(E_1)$  и  $g_2 = g_2(E_2)$  в запрещенной зоне полупроводника записываются в виде [8]

$$N_Z = N \int_{-\infty}^{+\infty} f_Z g_1 g_2 dE_1 dE_2, \qquad (2)$$

где  $f_Z$  — вероятность того, что дефект находится в одном из трех возможных зарядовых состояний Z = -1, 0, +1; условие нормировки:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_1 dE_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} g_2 dE_2 = 1$$

Если пренебречь возбужденными состояниями радиационных дефектов, то, согласно [10], обратные функции распределения  $1/f_Z$  дефектов в c'- и v'-зонах по зарядовым состояниям суть [11]

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_{-1}} &= 1 + \beta_2 \exp\left(\frac{E_{\rm F}^{(v)} + E_2}{k_{\rm B}T}\right) + \frac{\beta_2}{\beta_1} \exp\left(\frac{E_1 + E_2 + 2E_{\rm F}^{(v)}}{k_{\rm B}T}\right),\\ \frac{1}{f_0} &= 1 + \frac{1}{\beta_1} \exp\left(\frac{E_{\rm F}^{(v)} + E_1}{k_{\rm B}T}\right) + \frac{1}{\beta_2} \exp\left(\frac{-(E_{\rm F}^{(v)} + E_2)}{k_{\rm B}T}\right),\\ \frac{1}{f_{+1}} &= 1 + \beta_1 \exp\left(\frac{-(E_{\rm F}^{(v)} + E_1)}{k_{\rm B}T}\right) \\ &+ \frac{\beta_1}{\beta_2} \exp\left(\frac{-(E_1 + E_2 + 2E_{\rm F}^{(v)})}{k_{\rm B}T}\right), \end{aligned}$$
(3)

где  $E_{\rm F}^{(v)} = E_v - E_{\rm F}$  — уровень Ферми (химический потенциал)  $E_{\rm F}$ , отсчитанный от порога подвижности дырок *v*-зоны ( $E_v^{(\mu)} = 0$ ) нелегированного кристалла;  $E_{\rm F}^{(v)} < 0$ , если уровень Ферми находится в запрещенной зоне;  $E_1 = E_0 - E_{+1} > 0$ ,  $E_2 = E_{-1} - E_0 > 0$ ;  $k_{\rm B}T$  — тепловая энергия. Для радиационных дефектов в кремнии примем  $\beta_1 = \beta_0/\beta_{+1} = 1$ ,  $\beta_2 = \beta_0/\beta_{-1} = 1$ , где  $\beta_Z$  — число квантовых состояний дефекта в зарядовом состоянии Z с энергией  $E_Z$ .

Считаем, что энергетические уровни  $E_1$  и  $E_2$  в v'- и c'-зонах имеют нормальные распределения:

$$g_{1(2)}(E_{1(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}W_{1(2)}} \exp\left(\frac{-\left(E_{1(2)} - \overline{E_{1(2)}}\right)^2}{2W_{1(2)}^2}\right), \quad (4)$$

где  $W_1$ ,  $W_2$  — среднеквадратичные флуктуации энергетических уровней дефектов по кристаллу;  $\overline{E}_1$  и  $\overline{E}_2$  средние значения (центры v'- и c'-зон);  $E'_g = \overline{E}_2 - \overline{E}_1$  условная ширина энергетической щели между центрами c'- и v'-зон радиационных дефектов.

Будем считать, что энергии уровней среднестатистического дефекта в зарядовых состояниях (0), (+1) и в зарядовых состояниях (0), (-1), т.е. центры v'- и c'-зон, равны соответственно

$$\overline{E}_1 = I_1, \qquad \overline{E}_2 = I_2, \tag{5}$$

где  $I_1 = I_0 - I_{+1} > 0$ ,  $I_2 = I_{-1} - I_0 > 0$  — энергии, необходимые для перехода электрона из *v*-зоны на одиночный положительно заряженный (индекс 1) и на одиночный нейтральный (индекс 2) дефект. Для доминирующих радиационных дефектов в кремнии (в основном дивакансий), следуя эксперименту [4,12], примем  $I_1 = 250$  мэВ,  $I_2 = 550$  мэВ, т.е.  $E'_g = 300$  мэВ.

При суммарной концентрации заряженных радиационных дефектов и ионов примесей  $N_{\text{ion}} = N_{-1} + N_{+1} + Z_c KN$ , случайно (пуассоновски) распределенных по кристаллу, согласно модели [13] имеем равные среднеквадратичные флуктуации электростатической энергии, т.е. ширины v'- и c'-зон:

$$W = W_1 = W_2 = 1.64 \frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \left(\frac{4\pi}{3} N_{\rm ion}\right)^{1/3},$$
 (6)

где учтено кулоновское взаимодействие каждого заряженного дефекта только с ближайшим по расстоянию дефектом или ионом;  $\varepsilon = \varepsilon_r \varepsilon_0$  — статическая диэлектрическая проницаемость кристаллической решетки,<sup>1</sup>  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная,  $\varepsilon_r = 11.5$  — относительная диэлектрическая проницаемость кристаллического кремния.

Согласно [9], плотности прыжкового тока  $J_{h1}$  в v'-зоне и  $J_{h2}$  в c'-зоне радиационных дефектов (см. рис. 1) равны

$$J_{h1} = eN_{h1} \left[ M_{h1}\mathscr{E} + D_{h1} \frac{d}{dx} \ln\left(\frac{N_0}{N_{+1}}\right) \right],$$
  
$$J_{h2} = eN_{h2} \left[ M_{h2}\mathscr{E} + D_{h2} \frac{d}{dx} \ln\left(\frac{N_{-1}}{N_0}\right) \right].$$
(7)

Здесь  $\mathscr{E} = -d\varphi/dx$  — напряженность внешнего электрического поля,  $D_{h1}$ ,  $D_{h2}$  — коэффициенты диффузии прыгающих электронов,  $D_{h1}/M_{h1} = D_{h2}/M_{h2} = \xi k_{\rm B}T/e$ , где  $\xi \ge 1$ . Согласно [14], параметр  $\xi$  увеличивается при уширении c'- и v'-зон и отражает то обстоятельство, что прыжковая подвижность электронов уменьшается сильнее, чем их коэффициент диффузии, с ростом амплитуды беспорядка W в кристалле.

# 3. Расчет электрической емкости и поверхностной проводимости кремния в *c*'- и *v*'-зонах радиационных дефектов

Пусть внешнее электростатическое поле направлено по координатной оси *x* перпендикулярно плоской поверхности полупроводника, занимающего полупространство  $x \ge 0$ , и потенциал поля на поверхности  $\varphi(x=0) = \varphi_s$ . Экранирование внешнего электростатического поля обусловлено перераспределением электронов, прыгающих между дефектами в зарядовых состояниях (0), (-1) и (+1), т.е. миграцией зарядовых состояний неподвижных дефектов на расстояние, много большее среднего расстояния между ними. Атомы компенсирующей примеси полностью находятся в зарядовом состоянии  $Z_c$  и напрямую в экранировании поля не участвуют.

Для полупроводника с однородно распределенными точечными дефектами кристаллической решетки значения функции  $f_Z(\varphi)$  зависят от координаты x только через потенциал  $\varphi(x)$  и получаются из  $f_Z$  заме-

ной  $E_{\rm F}^{(v)} < 0$  в формулах (3) на

$$E_{\rm F}^{(v)}(\varphi) = E_{\rm F}^{(v)} - e\varphi(x), \tag{8}$$

т.е. при  $\varphi(x) < 0$  уровень Ферми  $E_{\rm F}^{(v)}(\varphi)$  смещается к потолку *v*-зоны, при  $\varphi(x) > 0$  — в глубь запрещенной зоны.

Изменение концентрации зарядовых состояний Z = -1, 0, +1 дефектов  $N_Z(\varphi) - N_Z$  в электрическом поле с потенциалом  $\varphi(x)$  определяется по (2) с учетом (8) и (3). При этом считается, что энергетическая щель  $\overline{E}_2 - \overline{E}_1 = E'_g$  между c'- и v'-зонами, а также ширина каждой зоны W не зависят от потенциала и даются формулами (5) и (6).

Электростатический потенциал  $\varphi(x)$  внутри полупроводника в точке с координатой *x* удовлетворяет уравнению Пуассона [10,11]

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{1}{2} \frac{d}{d\varphi} \left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2 = -\frac{\rho(\varphi)}{\varepsilon}$$
$$= \frac{e}{\varepsilon} \left[ N_{-1}(\varphi) - N_{+1}(\varphi) - N_{-1} + N_{+1} \right], \qquad (9)$$

где e — модуль заряда электрона,  $\rho(\varphi(x))$  — объемная плотность индуцированного заряда;  $N_{-1} - N_{+1} = Z_c K N$  — условие электронейтральности.

Интегрируя уравнение (9) по  $\varphi$  (от  $\varphi(x = 0) = \varphi_s$  до  $\varphi(x \to \infty) = 0$ ), получаем напряженность электрического поля на поверхности полупроводника:

$$-\frac{d\varphi}{dx}\Big|_{x=0} = \pm \left[\frac{2e}{\varepsilon}N\right]$$

$$\times \int_{\varphi_s}^{0} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \left[f_{+1}(\varphi) - f_{-1}(\varphi)\right]g_1g_2 dE_1 dE_2 + Z_c K\right) d\varphi \right]^{1/2};$$
(10)

для  $\varphi_s > 0$  следует брать знак "+", а для  $\varphi_s < 0$  — знак "-".

Согласно (9) и (10), индуцированный внешним электростатическим полем заряд, приходящийся на единицу площади поверхности полупроводника, есть

$$Q = \int_{0}^{\infty} \rho(x) dx = \int_{\varphi_x}^{0} \rho(\varphi) \left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^{-1} d\varphi = \varepsilon \left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=0}.$$
 (11)

Согласно [15], характерная толщина  $\Lambda$  приповерхностной области полупроводника, в которой равномерно распределен весь индуцированный внешним электрическим полем заряд Q с плотностью  $\rho(\varphi_s)$ , есть  $\Lambda = Q/\rho(\varphi_s)$ , где  $\rho(\varphi_s)$  — объемная плотность заряда при x = 0. Исходя из (11) с учетом (9), (10) имеем

$$\Lambda = \frac{Q}{\rho(\varphi_s)} = \frac{\varepsilon}{\rho(\varphi_s)} \frac{d\varphi}{dx}\Big|_{x=0},$$
 (12)

где  $ho(arphi_s) = e[N_{+1}(arphi_s) - N_{+1} - N_{-1}(arphi_s) + N_{-1}].$ 

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Считаем, что радиационные дефекты и примеси не вносят вклад в статическую диэлектрическую проницаемость кристаллов Si.

Из (12), следуя [15], при  $|e\varphi_s| \ll k_{\rm B}T$  получаем длину экранирования  $\Lambda_{\rm DH}$  в приближении Дебая—Хюккеля [8]:

$$\frac{1}{\Lambda_{\rm DH}^2} = \frac{e^2 N}{2\varepsilon k_{\rm B} T} \sum_{Z,Z'=-1}^{+1} (Z - Z')^2 \iint_{-\infty}^{+\infty} f_Z f_{Z'} g_1 g_2 dE_1 dE_2.$$
(13)

В пределе высоких температур и узких c'-, v'-зон  $(k_{\rm B}T \gg W)$  энергетические плотности распределения уровней дефектов по (4) с учетом (6) можно аппроксимировать  $\delta$ -функциями Дирака:  $g_2 = \delta(E_2 - \overline{E}_2)$ ,  $g_1 = \delta(E_1 - \overline{E}_1)$ . В этом случае из (13) имеем [16]:

$$\Lambda_{\rm DH} = \sqrt{\frac{\varepsilon k_{\rm B} T}{e^2 N_{sc}}},$$

где  $N_{sc} = N_{h1} + N_{h2} + N_{dip}$  — эффективная концентрация "активных" в экранировании внешнего электрического поля дефектов;  $N_{dip} = 4N_{+1}N_{-1}/N$  — концентрация электрических диполей, образованных радиационными дефектами в зарядовых состояниях (-1) и (+1);  $N_0 = N - N_{-1} - N_{+1}$  — концентрация дефектов в зарядовом состоянии (0).

Отметим, что в приближении Дебая—Хюккеля  $\varphi(x) = \varphi_s \exp(-x/\Lambda_{\rm DH})$  и плотность нескомпенсированного заряда на поверхности полупроводника  $\rho(\varphi_s) = -\varepsilon \varphi_s / \Lambda_{\rm DH}^2$ .

При выполнении трех условий  $|e\varphi_s| \gg E'_g$ , W,  $k_BT$  из формулы (12), следуя [15], получаем длину экранирования  $\Lambda_{SM}$  в приближении Шоттки–Мотта:

$$\Lambda_{\rm SM} = \begin{cases} \sqrt{\frac{-2\varepsilon\varphi_s}{e(1+Z_cK)N}} & \text{для} & -e\varphi_s \gg E'_g, \\ \\ \sqrt{\frac{2\varepsilon\varphi_s}{e(1-Z_cK)N}} & \text{для} & e\varphi_s \gg E'_g. \end{cases} \tag{14}$$

При этом в области  $0 \le x \le \Lambda_{\rm SM}$  полупроводника при  $\varphi_s < 0$  все дефекты находятся в зарядовом состоянии (+1), а при  $\varphi_s > 0$  — в зарядовом состоянии (-1). Отметим, что в приближении Шоттки-Мотта модуль потенциала  $|\varphi(x)| \propto (\Lambda_{\rm SM} - x)^2$ . При  $x > \Lambda_{\rm SM}$  электронейтральность кристалла считается ненарушенной, так что  $\varphi(x > \Lambda_{\rm SM}) = 0$ .

Дифференциальная электрическая емкость, приходящаяся на единицу площади плоской поверхности полупроводникового образца, есть

$$C = -\frac{dQ}{d\varphi_s} = \frac{\rho(\varphi_s)}{d\varphi/dx}\Big|_{x=0} = \frac{\varepsilon}{\Lambda},$$
 (15)

где Q и  $\Lambda$  определяются из соотношений (11) и (12), а  $d\varphi/dx\Big|_{x=0}$  по (10).

В приближении Дебая-Хюккеля из (15) с учетом (13) получаем  $C = C_{\rm DH} = \varepsilon / \Lambda_{\rm DH}$ , в приближении Шоттки-Мотта из (15) с учетом (14) получаем  $C = C_{\rm SM} = \varepsilon / \Lambda_{\rm SM}$ .

Заметим, что формула (15) получена для квазистационарного заполнения энергетических уровней по (3) с учетом (8), поэтому C — это квазистатическая (низкочастотная) емкость полупроводника. Условие квазистационарности выполняется при  $f \ll \Gamma_h$ , где f — частота измерительного сигнала,  $\Gamma_h$  — средняя частота прыжков электрона между дефектами. Иначе это можно выразить неравенством  $f \ll \sigma_h/\varepsilon$ , где  $\sigma_h = \sigma_{h2} + \sigma_{h1}$  — прыжковая электропроводность на постоянном токе,  $\varepsilon/\sigma_h$  максвелловское время релаксации при прыжковой проводимости.

Экспериментально измеряемая величина электрической емкости структуры металл-диэлектрик-полупроводник, согласно [17,18], равна  $C_{0x}C/(C_{0x}+C)$ , где  $C_{\text{ox}}$  — "емкость диэлектрика" между плоским металлическим электродом единичной площади<sup>2</sup> и полупроводниковым образцом с емкостью С. В структуре металл-диэлектрик-полупроводник (МДП) связь потенциала  $\varphi_s$  на поверхности полупроводника с электродным потенциалом U дается соотношением  $U = \varphi_{fb} - \varphi_s$ , где  $\varphi_{fb}$  — потенциал плоских зон (при наличии "встроенного" электрического заряда в диэлектрике или на гетерогранице полупроводник-диэлектрик при  $\phi = 0$ ). В режиме экранирования внешнего электрического поля по Дебаю-Хюккелю ( $|e\phi_s| \ll k_B T$ ) толщина области пространственного заряда  $\Lambda \to \Lambda_{\rm DH}$ , емкость полупроводника по (15) в режиме плоских зон есть  $C \rightarrow C_{\text{DH}} = \varepsilon / \Lambda_{\text{DH}}$ , где  $\Lambda_{\text{DH}}$  определяется по (13). При этом емкость МДП структуры единичной площади в режиме плоских зон есть  $C_{\rm ox}C_{\rm DH}/(C_{\rm ox}+C_{\rm DH})$ , где  $C = C_{\rm DH}$  — емкость полупроводника. В режиме экранирования по Шоттки-Мотту ( $|e\phi_s| \gg E'_g$ ) толщина области пространственного заряда  $\Lambda \to \Lambda_{SM},$  так что по (15)емкость полупроводника  $C \rightarrow C_{\rm SM} = \varepsilon / \Lambda_{\rm SM}$ , где  $\Lambda_{\rm SM}$ определяется по (14).

Изменение под действием эффекта поля прыжковой поверхностной проводимости образца  $\Delta G_s(\varphi_s)$ , осуществляемой прыжками по дефектам в зарядовых состояниях (+1), (0) и (-1), определяется формулой (по аналогии с зонной электропроводностью [10])

$$\frac{\Delta G_s(\varphi_s)}{eM_{h1}} = \int_0^\infty \left\{ \left[ N_{h1}(x) + bN_{h2}(x) \right] - \left[ N_{h1} + bN_{h2} \right] \right\} dx$$
$$= \int_{\varphi_s}^0 \frac{\left[ N_{h1}(\varphi) + bN_{h2}(\varphi) \right] - \left[ N_{h1} + bN_{h2} \right]}{d\varphi/dx} d\varphi,$$
(16)

где  $b = M_{h2}/M_{h1}$  — отношение подвижностей электронов, прыгающих в c'- и v'-зонах; концентрации прыгающих электронов:  $N_{h1}(\varphi) = N_0(\varphi)N_{+1}(\varphi)/N$ ,  $N_{h2}(\varphi) = N_{-1}(\varphi)N_0(\varphi)/N$ ,  $N_{h1} = N_0N_{+1}/N$ ,  $N_{h2} = N_{-1}N_0/N$ .

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Емкость границы металл-диэлектрик может быть включена в эффективную толщину диэлектрика [19].



Рис. 2. Рассчитанные по (2) температурные зависимости концентраций прыгающих в v'- и c'-зонах электронов  $N_{h1} = N_0 N_{+1}/N$  (1, 3, 5) и  $N_{h2} = N_{-1} N_0/N$  (2, 4, 6) для  $N = 10^{19} \text{ см}^{-3}$  и  $E'_g = \overline{E}_2 - \overline{E}_1 = 0.3$  эВ: 1, 2 — K = 0; 3, 4 — K = 0.1,  $Z_c = +1$ ; 5, 6 — K = 0.1,  $Z_c = -1$ .

Формула (16) дает изменение поверхностной проводимости квадратного образца (единичной длины и ширины) через боковую поверхность, таким образом размерность  $\Delta G_s(\varphi_s)$  есть См/ $\Box$ .

С учетом формул (9) и (10) перепишем (16) в виде

$$\frac{\Delta G_{s}(\varphi_{s})}{eM_{h1}} = \int_{\varphi_{s}}^{0} \frac{\left[N_{h1}(\varphi) + bN_{h2}(\varphi)\right] - \left[N_{h1} + bN_{h2}\right]}{\pm \sqrt{-(2/\varepsilon)\int_{0}^{\varphi} \rho(\varphi')d\varphi'}} d\varphi,$$
(17)

где "+" для  $\phi_s < 0$  и "–" для  $\phi_s > 0$ .

Все расчеты проводились для температур  $T < 450 \,\mathrm{K}$ и  $E'_g = \overline{E}_2 - \overline{E}_1 = 0.3 \,\mathrm{sB}$ . Уровень Ферми определялся из условия электронейтральности (1), ширины c'- и v'зон дефектов W рассчитывались по (6) путем самосогласования: бралось пробное значение ширины зоны, на основании этого значения вычислялась энергия уровня Ферми из условия (1), полученное значение  $E_{\mathrm{F}}^{(v)}$  использовалось в (6) для получения более точного значения W, снова вычислялось значение  $E_{\mathrm{F}}^{(v)}$  и т.д.

На рис. 2 показаны рассчитанные по формуле (2) температурные зависимости концентраций прыгающих в v'-и c'-зонах электронов  $N_{h1} = N_0 N_{+1}/N$  и  $N_{h2} = N_{-1} N_0/N$ для  $N = 10^{19} \, {\rm cm}^{-3}$ : для некомпенсированного полупроводника (K=0) — кривые 1, 2 соответственно, для компенсированного полупроводника (K=0.1) — кривые 3, 4 для  $Z_c=+1$  и кривые 5, 6 для  $Z_c=-1$ . Видно, что  $N_{h2}$  для  $Z_c=+1$  и  $N_{h1}$  для  $Z_c=-1$  (кривые 4, 5) практически не зависят от температуры (пока выполняется условие  $E_g'>3k_{\rm B}T$ ).

На рис. З представлены рассчитанные по формуле (15) при учете (1)–(12) зависимости квазистатической емкости кремния C от внешнего электростатического потенциала  $\varphi_s$  на его поверхности при  $N = 10^{19}$  см<sup>-3</sup> для

различных степеней компенсации дефектов: K = 0 (кривая I), K = 0.1 (кривые 2, 3 для  $Z_c = +1, -1$  соответственно). Из рис. 3 видно, что только при K = 0 емкость является четной функцией поверхностного потенциала  $C(\varphi_s) = C(-\varphi_s)$ .

Здесь отметим, что максимальное значение емкости полупроводника (при K = 0 и  $\varphi_s \approx 0.17$  В, см. рис. 3) составляет 3.5 мкФ/см<sup>2</sup>. Такую емкость на единицу площади имеет диоксид кремния ( $\varepsilon_r = 3.9$ ) толщиной примерно 1 нм. Это говорит о перспективности применения сильнодефектного кремния в качестве варактора.

На рис. 4 даны температурные зависимости емкости в приближении Дебая–Хюккеля  $C = C_{\rm DH} = \varepsilon/\Lambda_{\rm DH}$  (кривая 1, формула (13)) и при потенциале  $e\varphi_s = \pm E'_g/2$  (кривая 2, формула (15)) для K = 0 при  $N = 10^{19}$  см<sup>-3</sup> и  $E'_g = 0.3$  эВ. Расчет для компенсированного полупроводника показывает, что емкость C слабо зависит от температуры и лежит в промежутке между кривыми 1 и 2 на рис. 4. Видно, что в аррениусовских координатах зависи-



**Рис. 3.** Расчет зависимости емкости *C* кристалла кремния от электростатического потенциала на его поверхности  $\varphi_s$  для  $N = 10^{19} \text{ см}^{-3}$  и  $E'_g = 0.3$  эВ при T = 300 К и степенях компенсации K = 0 (*I*) и K = 0.1 (*2*, *3*).  $2 - Z_c = +1$ ,  $3 - Z_c = -1$ .



**Рис. 4.** Температурные зависимости емкости по (15):  $I - |e\varphi_s| \ll k_{\rm B}T$ ,  $\Lambda = \Lambda_{\rm DH}$  по (13);  $2 - e\varphi_s = \pm E'_g/2$ ,  $\Lambda$  по (12). K = 0,  $N = 10^{19}$  см<sup>-3</sup> и  $E'_g = 0.3$  эВ.



**Рис. 5.** Расчет зависимости изменения прыжковой проводимости кремния в режиме эффекта поля  $\Delta G_s$  от электростатического потенциала на поверхности  $\varphi_s$  для  $N = 10^{19}$  см<sup>-3</sup> и  $E'_g = 0.3$  эВ при T = 300 К и степенях компенсации K = 0 (1) и K = 0.1 (2, 3).  $2 - Z_c = +1$ ,  $3 - Z_c = -1$ .

мость C(T) представляет собой прямую с термической энергией активации  $\Delta E_t \approx 68$  мэВ (прямая *I* на рис. 4). При этом электростатическая ширина c'- и v'-зон *W* по (6) увеличивается при нагревании (от 0.27 мэВ при T = 100 K до 22 мэВ при T = 400 K) из-за увеличения концентрации ионизированных дефектов. Здесь отметим, что увеличение емкости сильнодефектного кремния при нагревании может быть интерпретировано как увеличение его диэлектрической проницаемости [7].

На рис. 5 представлены рассчитанные по формуле (17) при учете (1)–(8) зависимости изменения прыжковой проводимости кремния  $\Delta G_s$  в режиме эффекта поля от внешнего электростатического потенциала  $\varphi_s$  на его поверхности при  $N = 10^{19}$  см<sup>-3</sup> для различных степеней компенсации радиационных дефектов: K = 0 (кривая I), K = 0.1 (кривые 2, 3 для  $Z_c = +1$ , -1 соответственно). При расчете  $\Delta G_s$  полагалось  $b = M_{h2}/M_{h1} = 1$ , т.е. равенство прыжковых подвижностей электронов в c'- и v'-зонах точечных радиационных дефектов.

#### 4. Заключение

Рассмотрены электрическая емкость и эффект поля в сильнодефектном кремнии с прыжковым механизмом обмена электронами между точечными радиационными дефектами одного сорта (типа) в трех зарядовых состояниях (-1), (0) и (+1), т.е. когда дефекты формируют c'- и v'-зоны в запрещенной зоне. Принималось, что прыжковые подвижности электронов в c'- и v'-зонах одинаковы. Расчет дает немонотонную зависимость емкости и поверхностной прыжковой электропроводности от потенциала на поверхности полупроводника как в режиме заполнения дефектов электронами (увеличение концентрации дефектов в зарядовом состоянии (-1)), так и в режиме их опустошения электронами (увеличение концентрации дефектов в зарядовом состоянии (+1)).

Работа поддержана программой "Электроника" Министерства образования Республики Беларусь и Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 04-02-16587а), Фондом президента РФ (проект НШ-5920.2006.02), президиумом и ОФН РАН.

### Список литературы

- [1] В.А. Козлов, В.В. Козловский. ФТП, 35 (7), 769 (2001).
- [2] А. Милнс. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках (М., Мир, 1977).
- [3] Ж. Бургуэн, М. Ланно. Точечные дефекты в полупроводниках. Экспериментальные аспекты (М., Мир, 1985).
- [4] P.F. Lugakov, T.A. Lukashevich, V.V. Shusha. Phys. Status Solidi A, 74 (2), 445 (1982).
- [5] V.N. Brudnyi, S.N. Grinyaev, N.G. Kolin. Physica B, 348 (1-4), 213 (2004).
- [6] M. McPherson. Physica B, **344** (1–4), 52 (2004).
- [7] P.W. Żukowski, S.B. Kantorow, K. Kiszczak, D. Mączka, A. Rodzik, V.F. Stelmakh, E. Czarnecka-Such. Phys. Status Solidi A, **128** (2), K117 (1991).
- [8] N.A. Poklonski, V.F. Stelmakh, V.D. Tkachev, S.V. Voitikov. Phys. Status Solidi B, 88 (2), K165 (1978).
- [9] Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин. ФТТ, 40 (10), 1805 (1998).
- [10] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупровод*ников (М., Наука, 1990).
- [11] Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, С.Л. Поденок. Статистическая физика полупроводников (М., КомКнига, 2005).
- [12] Н.В. Кузнецов, Г.Г. Соловьев. Радиационная стойкость кремния (М., Энергоатомиздат, 1989).
- [13] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло, Г. Бискупски. ФТП, 33 (4), 415 (1999).
- [14] Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин, А.Г. Забродский. ФТТ, 42 (3), 432 (2000).
- [15] Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский. ФТП, 41 (1), 31 (2007).
- [16] Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский. ФТП, 40 (4), 400 (2006).
- [17] В.Н. Овсюк. Электронные процессы в полупроводниках с областями пространственного заряда (Новосибирск, Наука, 1984).
- [18] А.Г. Ждан, Н.Ф. Кухарская, Г.В. Чучева. ФТП, 37 (6), 686 (2003).
- [19] J. Krupski. Phys. Status Solidi B, 157 (1), 199 (1990).

Редактор Л.В. Шаронова

### Field effect and electrical capacitance of silicon crystals at hopping conductance via point radiative defects "localizing" Fermi level

N.A. Poklonski, S.A. Vyrko, A.G. Zabrodskii\*

Belarusian State University, 220030 Minsk, Belarus \* loffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences, 194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The calculation of static field effect and electrical capacitance of silicon crystals at hopping conductance via defects in charge states (+1), (0) and (-1) "localizing" Fermi level has been conducted. In the band gap of the silicon defects in charge states (0) and (+1) form v'-band, and in charge states (-1) and (0) form c'-band. The width of the energy c'- and v'-bands is calculated in assumption of Coulomb interaction of each charged defect only with nearest by distance ion. The energy gap between c'- and v'-bands of defects is assumed to be constant. It is predicted the nonmonotonic dependence of capacity and surface hopping conductivity on the electric potential on the surface of heavily defected silicon crystals.