

# Расчет электрической емкости самокомпенсированных полупроводников с межцентровыми прыжками одного и двух электронов (на примере кремния с радиационными дефектами)

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

Белорусский государственный университет,  
220030 Минск, Республика Беларусь

\* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 21 февраля 2008 г. Принята к печати 7 марта 2008 г.)

Проведен расчет низкочастотной электрической емкости кристаллов кремния при прыжковой миграции как одиночных электронов, так и биполяронов (пар электронов) по дефектам одного сорта (типа), „стабилизирующим“ уровень Ферми в окрестности середины запрещенной энергетической зоны. Рассматриваются кристаллы с двухуровневыми дефектами в трех зарядовых состояниях (+1, 0, -1) либо с положительной, либо с отрицательной корреляционной энергией. Показано, что с ростом абсолютной величины внешнего потенциала емкость кремния, содержащего дефекты с положительной корреляционной энергией, увеличивается, а содержащего дефекты с отрицательной корреляционной энергией, — уменьшается. Впервые записано выражение для дрейфовой и диффузионной компонент плотности тока биполяронов, прыгающих с дефектов в зарядовых состояниях (-1) на дефекты в зарядовых состояниях (+1).

PACS: 61.82.Fk, 71.38.Mx, 71.55.Cn, 72.20.Ee

## 1. Введение

Ионизирующее излучение (радиация), создавая дефекты, модифицирует свойства полупроводниковых материалов, что используется при создании новых функциональных элементов электроники [1]. Экспериментально установлено, что в кристаллах кремния с ростом флюенса радиации уровень Ферми  $E_F$  для электронов смещается к предельному положению в запрещенной энергетической зоне, отстоящему примерно на 0.39 эВ от потолка валентной зоны ( $v$ -зоны) (см., например, [2,3]). При этом в широком интервале температур прыжковая электропроводность по радиационным дефектам намного превышает зонную — электронов зоны проводимости ( $c$ -зоны) и(или) дырок валентной зоны ( $v$ -зоны). В работе [4] сообщается об увеличении в несколько раз низкочастотной емкости сильнодефектных кристаллов кремния, полученных под воздействием радиации, при их нагревании, однако количественного описания этого эффекта нет. Отметим, что в [5] методом емкостной спектроскопии на механически шлифованной поверхности кремниевого  $p$ - $n$ -перехода на фоне зонной электропроводности выявлены межцентровые переходы электронов. Это, по-видимому, является следствием того, что многие точечные дефекты в кремнии обладают свойством бистабильности,<sup>1</sup> т.е. при изменении зарядового и(или) спинового состояний могут изменять свою атомную конфигурацию и(или) местоположение в кристаллической решетке [7,8].

В кристаллических материалах среди точечных дефектов (центров), между которыми прыгают электроны

и(или) дырки (электронные вакансии), условно выделяют „жесткие“ ( $t$ ) и „мягкие“ ( $s$ ) дефекты (см. обзоры [9–13]). Энергетические уровни  $t$ -дефектов с ростом зарядового состояния дефекта приближаются к одной из зон разрешенных энергий. Прыжки электронов между  $t$ -дефектами осуществляются в основном поодиночке [14]. Напротив, для  $s$ -дефектов характерны прыжки не одиночных электронов, а электронных пар (биполяронов) [15], при этом энергетические уровни  $s$ -дефектов, как правило, расположены в обратном порядке.<sup>2</sup>

Цель работы — развитие методов расчета низкочастотной электрической емкости полупроводниковых кристаллов, содержащих дефекты в трех зарядовых состояниях (+1, 0, -1) одного сорта (типа) с положительной корреляционной энергией [21], на случай кристаллов, содержащих дефекты с отрицательной корреляционной энергией [7]. Предполагается, что электропроводность на постоянном токе осуществляется посредством прыжков как одиночных электронов, так и пар электронов (биполяронов) между этими точечными дефектами кристаллической матрицы. В качестве примера расчеты выполнены для кристаллов кремния, в которых значительные концентрации точечных дефектов могут быть созданы сочетанием воздействия ионизирующего излучения и термического отжига [1–4].

Рассмотрим два сильнодефектных кристалла кремния, содержащих соответственно точечные двухуров-

<sup>2</sup> Дефекты  $s$ -типа с отрицательной корреляционной энергией обуславливают особенности зонной фотопроводимости полупроводниковых сплавов, содержащих примесные атомы одного сорта в трех зарядовых состояниях [16]. Подобные центры (дефекты), по-видимому, реализуются в галогенидах серебра [17] и высокотемпературных сверхпроводниках [18]. Связанные пары электронов впервые были рассмотрены в [19] при описании концентрационного фазового перехода изолятор–металл в натрий-аммиачных растворах, замороженных жидким воздухом (см. также [20]).

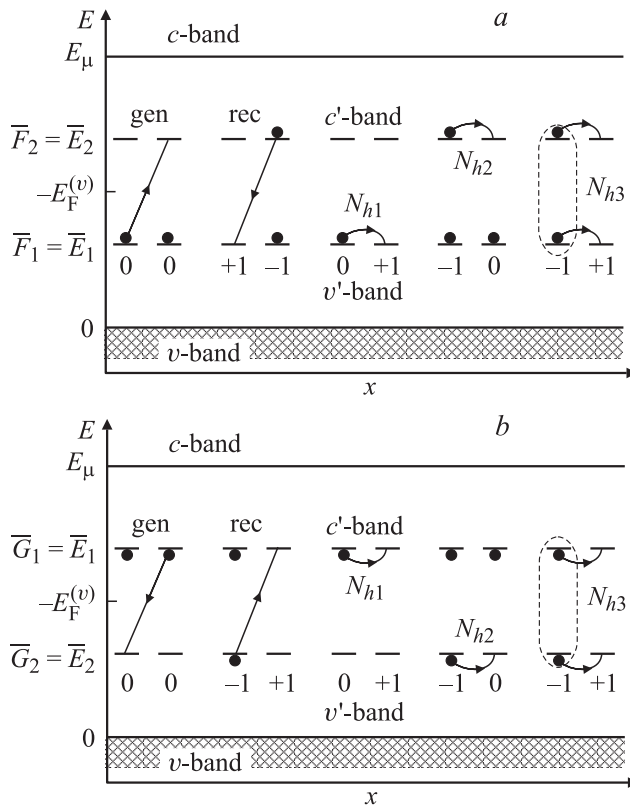
<sup>¶</sup> E-mail: poklonski@bsu.by

<sup>1</sup> Симметрия и механизм метастабильности  $EL2$ -центра (двойного донора) в кристаллах арсенида галлия идентифицированы в работе [6].

невые дефекты двух сортов ( $s$  и  $t$ ) в концентрации, достаточной для стабилизации уровня Ферми  $E_F$  в запрещенной энергетической зоне. Дефекты  $t$ -типа в зарядовых состояниях (+1) и (0) формируют  $v'$ -зону, а в зарядовых состояниях (0) и (-1) формируют  $c'$ -зону в запрещенной зоне, расположенную ближе к  $c$ -зоне, чем  $v'$ -зона (рис. 1,  $a$ ). Дефекты  $s$ -типа имеют обратное положение энергетических уровней (рис. 1,  $b$ ):  $c'$ -зона — зарядовые состояния (+1, 0),  $v'$ -зона — (0, -1). Примерами  $t$ -дефектов могут служить амфотерные примеси (Au, Cu), а  $s$ -дефектов — случайно расположенные в кремнии многовакансионные комплексы, которые изменяют свой объем при изменении зарядового состояния  $Z = -1, 0, +1$ .

## 2. Основные соотношения

Пусть радиационные дефекты имеют три зарядовых состояния (-1, 0, +1) либо с положительной корреляционной энергией ( $t$ -дефекты, рис. 1,  $a$ ), либо с отрица-



**Рис. 1.** Одноэлектронная энергия  $E$  как функция координаты  $x$  в разупорядоченном кремнии с точечными  $t$ -дефектами ( $a$ ) и  $s$ -дефектами ( $b$ ):  $E_\mu$  — уровень (порог) подвижности электронов  $c$ -зоны,  $E_F^{(v)} < 0$  — уровень Ферми в запрещенной зоне, отсчитанный от  $E_v = 0$  — порога подвижности дырок  $v$ -зоны;  $|\bar{E}_2 - \bar{E}_1| = E_g'$  — ширина энергетической щели между  $c'$ - и  $v'$ -зонами, сформированными дефектами; прямые стрелки — генерационные (gen) и рекомбинационные (rec) одноэлектронные переходы;  $N_{h1}, N_{h2}$  — концентрации прыгающих одиночных электронов,  $N_{h3}$  — концентрация прыгающих между дефектами пар электронов.

тельной корреляционной энергией ( $s$ -дефекты, рис. 1,  $b$ ). Суммарные концентрации  $t$ - и  $s$ -дефектов равны:  $N = N_{t,-1} + N_{t,0} + N_{t,+1} = N_{s,-1} + N_{s,0} + N_{s,+1}$ . Условия электронейтральности кристаллов с дефектами ( $t$  или  $s$ ) имеют вид:  $N_{t,-1} = N_{t,+1}, N_{s,-1} = N_{s,+1}$ . Индексы  $t$  и  $s$  при записи формул далее не указаны.

Концентрации  $s$ - и  $t$ -дефектов в зарядовых состояниях  $Z = -1, 0, +1$  с учетом энергетических плотностей состояний  $g_1 = g_1(E_1)$  и  $g_2 = g_2(E_2)$  в запрещенной зоне суть [21]

$$N_Z = N \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_Z g_1 g_2 dE_1 dE_2 \equiv N \bar{f}_Z,$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_1 dE_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} g_2 dE_2 = 1, \quad (1)$$

где вероятность  $f_Z$  того, что  $t$ - и  $s$ -дефекты находятся в зарядовом состоянии  $Z$ , есть [22] (см. частные случаи в [23,24])

$$f_{tZ} = \frac{\exp[-(ZE_F + F_{tZ})/k_B T]}{\sum_Z \exp[-(ZE_F + F_{tZ})/k_B T]},$$

$$f_{sZ} = \frac{\exp[-(ZE_F + G_{sZ})/k_B T]}{\sum_Z \exp[-(ZE_F + G_{sZ})/k_B T]}.$$

Здесь  $F_{tZ} = E_{tZ} - TS_{tZ} = E_{tZ} - k_B T \ln \gamma_{tZ}$  — свободная энергия Гельмгольца,  $S_{tZ}$  — энтропия,  $\gamma_{tZ} = \gamma_t(Z, E_{tZ})$  — число внутренних состояний  $t$ -дефекта с зарядом  $Ze$  и энергией  $E_{tZ}$ ,  $k_B T$  — тепловая энергия,  $G_{sZ} = E_{sZ} + PV_Z - TS_{sZ} = E_{sZ} + PV_Z - k_B T \ln \gamma_{sZ}$  — свободная энергия Гиббса,  $P$  — давление кремниевой матрицы на область объемом  $V_Z$ , занимаемую дефектом,  $S_{sZ}$  — энтропия,  $\gamma_s(Z, E_{sZ})$  — число внутренних состояний  $s$ -дефекта в зарядовом состоянии  $Z$  с энергией  $E_{sZ}$  и объемом  $V_Z$ . За начало отсчета  $F_{tZ}$  и  $G_{sZ}$  принят порог подвижности дырок  $v$ -зоны ( $E_v = 0$ ; рис. 1,  $a, b$ ):  $F_1 = F_{t,0} - (F_{t,+1} + E_v) > 0$ ;  $F_2 = F_{t,-1} - (F_{t,0} + E_v) > 0$ ;  $G_1 = G_{s,0} - (G_{s,+1} + E_v) > 0$ ;  $G_2 = G_{s,-1} - (G_{s,0} + E_v) > 0$ . Энергия уровня Ферми  $E_F^{(v)} = E_v - E_F < 0$  в запрещенной зоне полупроводника отсчитывается от  $E_v = 0$ . Далее  $F_1$  и  $G_1$  обозначаются через  $E_1$ , а  $F_2$  и  $G_2$  через  $E_2$ .

Считаем, что энергетические уровни дефектов  $E_1$  и  $E_2$  в  $v'$ - и  $c'$ -зонах распределены нормально [21,25]:

$$g_{1(2)}(E_{1(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}W_{1(2)}} \exp\left[-\frac{(E_{1(2)} - \bar{E}_{1(2)})^2}{2W_{1(2)}^2}\right],$$

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

где  $W_1 = W_2$  — среднеквадратичные флуктуации энергетических уровней (ширины  $v'$ - и  $c'$ -зон);<sup>3</sup>  $\bar{E}_1$

<sup>3</sup> Рассматривается случай классических  $c'$ - и  $v'$ -зон, т.е. когда энергетический разброс уровней дефектов из-за чисто кулоновского взаимодействия ближайших ионов [25] много больше квантового уширения их уровней, обусловленного конечностью времени локализации на дефектах электронов (или биполярнонов).

и  $\bar{E}_2$  — средние значения (центры  $v'$ - и  $c'$ -зон);  $E'_g = |\bar{E}_2 - \bar{E}_1|$  — условная ширина энергетической щели между центрами  $c'$ - и  $v'$ -зон радиационных дефектов,  $e$  — модуль заряда электрона,  $\varepsilon = 11.5\varepsilon_0$  — статическая диэлектрическая проницаемость кремния,  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная,  $N_{\text{ion}} = N_{-1} + N_{+1}$  — суммарная концентрация заряженных  $t$ -дефектов или  $s$ -дефектов. Для  $t$ - и  $s$ -дефектов в кремнии, следуя оценкам в работах [2,4,8], примем:  $\bar{F}_1 = \bar{E}_1 = 250$  мэВ,  $\bar{F}_2 = \bar{E}_2 = 550$  мэВ;  $\bar{G}_1 = \bar{E}_1 = 550$  мэВ,  $\bar{G}_2 = \bar{E}_2 = 250$  мэВ, так что  $E'_g = 300$  мэВ.

Пусть сильнодефектный кристалл кремния занимает полупространство  $x \geq 0$ . Предположим, что все физические величины не зависят от координат  $y$  и  $z$ . Согласно [26], плотности прыжкового одноэлектронного тока  $J_{h1}$  в  $v'$ -зоне и  $J_{h2}$  в  $c'$ -зоне для  $t$ - и  $s$ -дефектов (рис. 1) есть

$$J_{h1} = J_{0,+1} = eN_{h1} \left[ M_{h1} \mathcal{E} + D_{h1} \frac{d}{dx} \ln \left( \frac{N_0}{N_{+1}} \right) \right],$$

$$J_{h2} = J_{-1,0} = eN_{h2} \left[ M_{h2} \mathcal{E} + D_{h2} \frac{d}{dx} \ln \left( \frac{N_{-1}}{N_0} \right) \right], \quad (3)$$

где  $N_{h1} = N_0 N_{+1} / N$ ,  $N_{h2} = N_{-1} N_0 / N$  — концентрации прыгающих в  $v'$ - и  $c'$ -зонах электронов,  $M_{h1}, M_{h2}$  — дрейфовые прыжковые подвижности,  $\mathcal{E} = -d\varphi/dx$  — напряженность внешнего электрического поля,  $D_{h1}, D_{h2}$  — коэффициенты диффузии прыгающих по дефектам одиночных электронов. В соотношениях Эйнштейна  $D_{h1}/M_{h1} = \xi_{0,+1} k_B T / e$ ,  $D_{h2}/M_{h2} = \xi_{-1,0} k_B T / e$  параметр  $\xi_{z,z'} \geq 1$  увеличивается при уширении  $c'$ - и  $v'$ -зон, так как дрейфовая прыжковая подвижность электронов по дефектам с ростом амплитуды беспорядка  $W$  уменьшается сильнее, чем их коэффициент диффузии. (Сравнение расчетов по формулам (3) с экспериментальными данными по прыжковой электропроводности кристаллов  $p$ -Ge:Ga на постоянном токе представлено в [27].)

Для  $t$ - и  $s$ -дефектов наряду с одноэлектронными переходами (3) необходимо дополнительно учитывать плотность тока биполяронов, т.е., согласно рис. 1, прыжки пар электронов с дефектов в зарядовых состояниях  $(-1)$  на дефекты в зарядовых состояниях  $(+1)$ . Следуя схеме вывода формул (3) в [26,27], для плотности тока биполяронов имеем

$$J_{h3} = J_{-1,+1} = 2eN_{h3} \left[ M_{h3} \mathcal{E} + D_{h3} \frac{d}{dx} \ln \left( \frac{N_{-1}}{N_{+1}} \right) \right], \quad (4)$$

где  $2e$  — модуль заряда биполярона,  $N_{h3} = N_{-1} N_{+1} / N$  — концентрация прыгающих биполяронов,  $M_{h3}$  — дрейфовая прыжковая подвижность,  $D_{h3}$  — коэффициент диффузии прыгающих биполяронов;  $D_{h3}/M_{h3} = \xi_{-1,+1} k_B T / 2e \geq 1$ . (Различия вероятностей прыжков биполярона в синглетном и триплетном спиновых состояниях [28] между дефектами могут быть включены в случае необходимости в коэффициент диффузии и дрейфовую подвижность.)

Здесь отметим, что как для  $t$ -дефектов, так и для  $s$ -дефектов существуют (рис. 1) также одноэлектронные процессы генерации (gen) и рекомбинации (rec) между  $c'$ - и  $v'$ -зонами. В отсутствие подсветки одноэлектронный ток генерации  $J_{\text{gen}}$  (переход одного электрона между двумя нейтральными дефектами:  $2(0) \rightarrow (-1) + (+1)$ ) и одноэлектронный ток рекомбинации  $J_{\text{rec}}$  (переход одного электрона между двумя противоположно заряженными дефектами:  $(-1) + (+1) \rightarrow 2(0)$ ) взаимно компенсируют друг друга [26]. (Возможная роль токов  $J_{\text{gen}}$  и  $J_{\text{rec}}$  в фотопроводимости аморфных полупроводников обсуждается в [29].)

Пусть внешнее электростатическое поле направлено вдоль координатной оси  $x$  и потенциал поля на поверхности постоянный,  $\varphi(x=0) = \varphi_b$ . Потенциал  $\varphi(x)$  электрического поля внутри кремния в точке с координатой  $x \geq 0$  удовлетворяет уравнению Пуассона [22]

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = \frac{1}{2} \frac{d}{d\varphi} \left( \frac{d\varphi}{dx} \right)^2$$

$$= -\frac{\rho(\varphi)}{\varepsilon} = \frac{e}{\varepsilon} [N_{-1}(\varphi) - N_{+1}(\varphi)], \quad (5)$$

где  $\rho(\varphi(x))$  — объемная плотность индуцированного заряда в точке  $x$ . При  $\varphi = 0$  выполняется условие электрической нейтральности  $N_{-1} = N_{+1}$ .

При однородном распределении точечных радиационных дефектов по объему кремния значения функции  $f_z(\varphi)$  зависят от координаты  $x$  только через потенциал  $\varphi(x)$  и получаются из  $f_z$  заменой  $E_F^{(v)}$  на  $E_F^{(v)}(\varphi) = E_F^{(v)} - e\varphi(x)$ , т.е. при  $\varphi(x) < 0$  уровень Ферми  $E_F^{(v)}(\varphi)$  смещается к потолку  $v$ -зоны, при  $\varphi(x) > 0$  — в глубь запрещенной зоны. Считаем, что энергетическая щель  $E'_g$  между  $c'$ - и  $v'$ -зонами, а также их ширины  $W$  как для  $t$ -дефектов, так и для  $s$ -дефектов не зависят от потенциала внешнего электрического поля.

Из (5) получаем индуцированный внешним электростатическим полем заряд  $Q$ , приходящийся на единицу площади поверхности кремния:

$$Q = \int_0^{\infty} \rho(x) dx = \varepsilon \left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=0} = \pm \left[ 2e\varepsilon N \right.$$

$$\left. \times \int_{\varphi_b}^0 \left( \int_{-\infty}^{+\infty} [f_{+1}(\varphi) - f_{-1}(\varphi)] g_1 g_2 dE_1 dE_2 \right) d\varphi \right]^{1/2}, \quad (6)$$

для  $\varphi_b > 0$  следует брать знак „-“, а для  $\varphi_b < 0$  знак „+“.

Дифференциальная электрическая емкость, приходящаяся на единицу площади плоской поверхности образ-

ца кремния, с учетом (6) есть [21]

$$C = -\frac{dQ}{d\varphi_b} = \frac{eN \iint [f_{+1}(\varphi_b) - f_{-1}(\varphi_b)] g_1 g_2 dE_1 dE_2}{\mp \left[ -\frac{2k_B T N}{\varepsilon} \int_0^{\varphi_b} (\iint [f_{+1}(\varphi) - f_{-1}(\varphi)] g_1 g_2 dE_1 dE_2) d\varphi \right]^{1/2}} \equiv \frac{\varepsilon}{\Lambda}, \quad (7)$$

где  $\Lambda$  — условная толщина приповерхностной области образца, в которой распределен с постоянной объемной плотностью  $\rho(\varphi_b)$  весь индуцированный заряд  $Q = \Lambda \rho(\varphi_b)$ .

При  $|e\varphi_b| \ll k_B T$  (режим плоских  $c'$ - и  $v'$ -зон) из формулы (7) следует длина экранирования  $\Lambda \rightarrow \Lambda_{DH}$  ( $\Lambda_{DH}$  — длина экранирования в приближении Дебая–Хюккеля). В этом случае из (5) получаем:  $\rho(\varphi) = -e\varphi(x) \Lambda_{DH}^{-2}$ , где  $\varphi(x) = \varphi_b \exp(-x/\Lambda_{DH})$ , так что  $Q = \Lambda_{DH} \rho(\varphi_b)$ . Согласно [26,30], обратный квадрат длины экранирования электростатического потенциала в ковалентном кристалле с многозарядными точечными дефектами есть

$$\Lambda_{DH}^{-2} = \frac{e^2 N}{2\varepsilon k_B T} \sum_{Z, Z'=-1}^{+1} (Z - Z')^2 \iint_{-\infty}^{+\infty} f_{Z Z'} g_1 g_2 dE_1 dE_2 = \frac{e^2}{\varepsilon k_B T} \left( \frac{N_{h1}}{\xi_{0,+1}} + \frac{N_{h2}}{\xi_{-1,0}} + \frac{4N_{h3}}{\xi_{-1,+1}} \right), \quad \xi_{Z,Z'} = \frac{\bar{f}_Z \bar{f}_{Z'}}{\iint f_Z f_{Z'} g_1 g_2 dE_1 dE_2} \geq 1, \quad (8)$$

где  $N_{h1} = N_0 N_{+1}/N$ ,  $N_{h2} = N_{-1} N_0/N$  — концентрации прыгающих между дефектами одиночных электронов,  $N_{h3} = N_{-1} N_{+1}/N$  — концентрация биполяронов (пар электронов, одновременно прыгающих с дефектов в зарядовом состоянии  $(-1)$  на дефекты в зарядовом состоянии  $(+1)$ );  $N = N_{+1} + N_0 + N_{-1}$  — полная концентрация дефектов.

В пределе высоких температур и узких  $c'$ - и  $v'$ -зон ( $k_B T \gg W$ ) распределения (2) можно аппроксимировать  $\delta$ -функциями Дирака:  $g_1 = \delta(E_1 - \bar{E}_1)$ ,  $g_2 = \delta(E_2 - \bar{E}_2)$ . В этом случае из (8) с учетом (1) и (2) имеем:  $\xi_{0,+1} = \xi_{-1,0} = \xi_{-1,+1} = 1$ .

### 3. Результаты расчетов и их обсуждение

На рис. 2 представлены результаты вычислений емкости по формуле (7) с учетом (2) при различных значениях потенциала  $\varphi_b$  на поверхности кремния для  $N = 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (кривая  $I$  —  $t$ -дефекты, кривая  $I'$  —  $s$ -дефекты). Видно, что для  $\varphi_b = 0$  (так называемый режим плоских зон [31,32]) при прочих равных условиях емкость кремния, содержащего  $t$ -дефекты, минимальна,

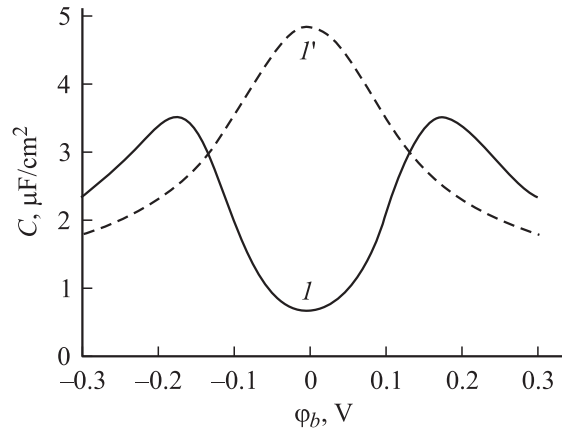


Рис. 2. Зависимости емкости  $C$  сильнодефектного кремния от потенциала  $\varphi_b$  на его поверхности для  $N = N_t = N_s = 10^{19} \text{ см}^{-3}$  и  $E_g' = 0.3 \text{ эВ}$  при  $T = 300 \text{ К}$ :  $I$  —  $t$ -дефекты,  $I'$  —  $s$ -дефекты.

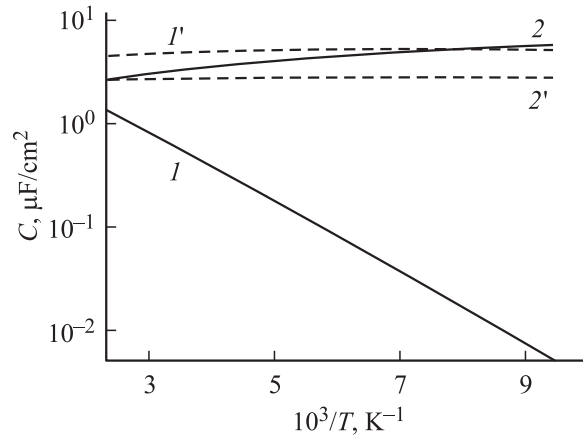
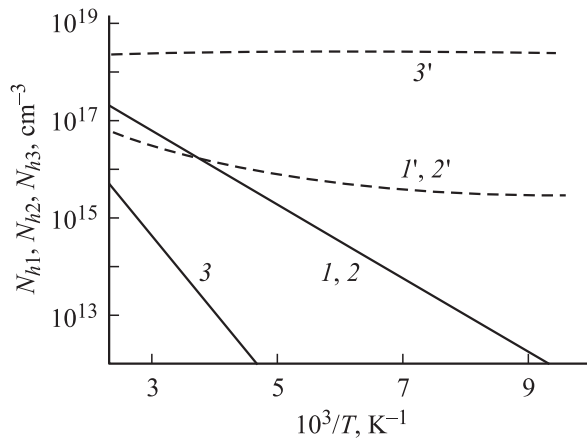


Рис. 3. Температурные зависимости емкости ( $N = 10^{19} \text{ см}^{-3}$  и  $E_g' = 0.3 \text{ эВ}$ ):  $I, I'$  —  $|e\varphi_b| \ll k_B T$  (приближение Дебая–Хюккеля);  $2, 2'$  —  $e\varphi_b = \pm E_g'/2$ . ( $I, 2$ ) —  $t$ -дефекты, ( $I', 2'$ ) —  $s$ -дефекты.

а содержащего  $s$ -дефекты — максимальна. Эта особенность зависимости емкости от потенциала на поверхности может служить критерием наличия в частично разупорядоченном кремнии дефектов с положительной или отрицательной корреляционной энергией.

Здесь отметим, что расчет барьерной емкости симметричного  $p^+ - n^+$ -перехода на кристаллическом кремнии при концентрации водородоподобных доноров и акцепторов  $10^{19} \text{ см}^{-3}$  по стандартной формуле из [32] дает  $0.6 \text{ мкФ/см}^2$  при температуре  $T = 300 \text{ К}$ . Сравнение этого значения емкости с данными на рис. 2 показывает перспективность применения сильнодефектного кремния в качестве варактора.

На рис. 3 даны зависимости  $C(T)$  при  $|e\varphi_b| \ll k_B T$  (кривая  $I$ ) и при  $e\varphi_b = \pm E_g'/2$  (кривая  $I'$ ) для  $N = 10^{19} \text{ см}^{-3}$  и  $E_g' = 0.3 \text{ эВ}$ . Термическая энергия активации емкости  $C(T)$  в режиме „плоских“ зон (кривая  $I$ ) равна  $\sim 68 \text{ мэВ}$ . Ширина  $c'$ - и  $v'$ -зон  $W_1 = W_2 = W_t$  для  $t$ -дефектов увеличивается при нагревании (от  $0.27 \text{ мэВ}$  при  $T = 100 \text{ К}$  до  $22 \text{ мэВ}$  при  $T = 400 \text{ К}$ ) из-за увели-



**Рис. 4.** Зависимости концентраций прыгающих между дефектами одиночных электронов  $N_{h1} = N_0 N_{+1} / N$  ( $I, I'$ ),  $N_{h2} = N_{-1} N_0 / N$  ( $2, 2'$ ), а также пар электронов  $N_{h3} = N_{-1} N_{+1} / N$  ( $3, 3'$ ) от температуры при  $N = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_{-1} = N_{+1}$  и  $E'_g = |\bar{E}_2 - \bar{E}_1| = 0.3 \text{ эВ}$ . ( $I, 2, 3$ ) — для  $t$ -дефектов, ( $I', 2', 3'$ ) — для  $s$ -дефектов.

чения концентрации ионизованных дефектов. Емкость и ширина  $c'$ - и  $v'$ -зон  $W_1 = W_2 = W_s = 71 \text{ мэВ}$  для  $s$ -дефектов практически не зависят от температуры. Видно, что для  $t$ -дефектов создание на поверхности кремния потенциала  $\phi_b = \pm E'_g / 2e$  от внешнего источника резко уменьшает зависимость емкости от температуры (ср. кривые  $I$  и  $2$ ). Здесь отметим, что экспоненциальное увеличение емкости при нагревании кремния с большой концентрацией радиационных дефектов связывается в работе [4] с увеличением его низкочастотной диэлектрической проницаемости. В предлагаемой же нами модели такое изменение емкости частично разупорядоченного кремния возможно для  $|e\phi_b| \ll k_B T$  (рис. 3, кривая  $I$ ) за счет уменьшения длины экранирования  $\Lambda$  внешнего электростатического поля при повышении температуры (см. формулы (7), (8)).

На рис. 4 показаны рассчитанные по формуле (1) температурные зависимости концентраций прыгающих в  $v'$ - и  $c'$ -зонах электронов  $N_{h1} = N_0 N_{+1} / N$ ,  $N_{h2} = N_{-1} N_0 / N$  и  $N_{h3} = N_{-1} N_{+1} / N$  для  $N = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ : соответственно кривые  $I, 2, 3$  для  $t$ -дефектов и  $I', 2', 3'$  для  $s$ -дефектов. Видно, что для  $s$ -дефектов концентрация биполяронов  $N_{h3}$  (кривая  $3'$ ) практически не зависит от температуры. Энергия активации концентрации прыгающих между  $t$ -дефектами одиночных электронов  $N_{h1} = N_{h2}$  равна  $152 \text{ мэВ}$  (кривые  $I, 2$ ), и энергия активации концентрации прыгающих биполяронов (пар электронов)  $N_{h3}$  между  $t$ -дефектами в зарядовых состояниях  $(-1)$  и  $(+1)$  равна  $304 \text{ мэВ}$  (кривая  $3$ ) при  $E'_g = 300 \text{ мэВ}$ . Для  $s$ -дефектов энергия термической активации концентрации прыгающих одиночных электронов  $N_{h1} = N_{h2}$  и биполяронов  $N_{h3}$  существенно меньше, чем для  $t$ -дефектов. При этом концентрация прыгающих пар электронов  $N_{h3}$  для  $s$ -дефектов много больше, чем для  $t$ -дефектов.<sup>4</sup>

<sup>4</sup> Заметим, что при фотоллизе  $\text{H}_2\text{O}$  на поверхности кристаллического полупроводника особенно медленно идет реакция выделения  $\text{O}_2$ , для

Отметим, что значение энергии уровня Ферми  $|E_F^{(v)}| = 400 \text{ мэВ}$ , полученное из условия электронейтральности  $N_{+1} = N_{-1}$  как для  $t$ -дефектов, так и для  $s$ -дефектов, не зависит от температуры, так как  $E_F^{(v)}$  находится посередине между примесными  $c'$ - и  $v'$ -зонами. Это практически совпадает с экспериментальным значением  $E_F^{(v)}$  в кремнии, содержащем большую концентрацию радиационных дефектов [2,3]. Для  $t$ -дефектов расчет безразмерных коэффициентов  $\xi_{0,+1}$ ,  $\xi_{-1,0}$  и  $\xi_{-1,+1}$  по формуле (8) для  $N = 10^{19} \text{ см}^{-3}$  в интервале от  $T = 80$  до  $450 \text{ К}$  дает  $\xi_{0,+1} = \xi_{-1,0} \approx \xi_{-1,+1} \approx 1$ . Для  $s$ -дефектов коэффициенты  $\xi_{0,+1} = \xi_{-1,0}$  монотонно уменьшаются примерно от 2 до 1 при увеличении температуры от 80 до 450 К, при этом  $\xi_{-1,+1}$  также монотонно уменьшается примерно от 8 до 2. Таким образом, значения коэффициентов  $\xi_{0,+1}$ ,  $\xi_{-1,0}$  и  $\xi_{-1,+1}$ , а также ширина  $c'$ - и  $v'$ -зон для  $s$ -дефектов больше, чем для  $t$ -дефектов. Это происходит потому, что при прочих равных условиях концентрация ионизованных  $s$ -дефектов больше, чем  $t$ -дефектов.

#### 4. Заключение

Рассчитана низкочастотная электрическая емкость сильнодефектного кремния с прыжковым обменом одним и двумя электронами между точечными радиационными двухуровневыми дефектами одного сорта (типа) в трех зарядовых состояниях  $(-1, 0, +1)$ , т.е. когда дефекты формируют  $c'$ - и  $v'$ -зоны в запрещенной зоне. Рассмотрены дефекты с положительной и отрицательной корреляционной энергией. Расчет дает немонотонную зависимость емкости от электрического потенциала на поверхности кремния 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  $(+1)$ ). Это свойство емкости сильнодефектного кремния может быть использовано для создания на его основе стойких к действию радиации варакторов. Показано, что в кремнии с прыжковой электропроводностью из измерений низкочастотной вольт-фарадной характеристики возможно определение типа точечных дефектов (с отрицательной или положительной корреляционной энергией). При этом частота измерительного сигнала должна быть меньше средней частоты прыжков одного и(или) двух электронов между дефектами.

Работа поддержана программой „Нанотех“ Министерства образования Республики Беларусь и Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 07-02-00156а), Фондом президента РФ (проект НШ-2951.2008.2), президиумом и ОФН РАН.

которой требуются две дырки на одну молекулу воды (см., например, [17,33]). Поэтому материалы, в которых электропроводность в объеме или на поверхности осуществляется посредством прыжков пар электронов (или пар электронных вакансий) между  $s$ -дефектами, могут ускорять эту реакцию.

## Список литературы

- [1] В.В. Козловский. *Модифицирование полупроводников пучками протонов* (СПб., Наука, 2003).
- [2] M. McPherson. *Physica B*, **344** (1–4), 52 (2004).
- [3] В.Н. Брудный, Н.Г. Колин, Л.С. Смирнов. *ФТП*, **41** (9), 1031 (2007).
- [4] 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).
- [5] В.С. Львов, В.И. Стриха, О.В. Третьяк, А.А. Шматов. *ФТТ*, **31** (11), 206 (1989).
- [6] Н.Т. Баграев. *ЖЭТФ*, **100** (4[10]), 1378 (1991).
- [7] R.D. Harris, J.L. Newton, G.D. Watkins. *Phys. Rev. B*, **36** (2), 1094 (1987).
- [8] Б.Н. Мукашев, Х.А. Абдуллин, Ю.В. Горелкинский. *УФН*, **170** (2), 143 (2000).
- [9] И.А. Драбкин, Б.Я. Мойжес. *ФТП*, **15** (4), 625 (1981).
- [10] A.R. Long. *Adv. Phys.*, **31** (5), 553 (1982).
- [11] С.П. Ионов. *Изв. АН СССР. Сер. физ.*, **49** (2), 310 (1985).
- [12] С.Д. Барановский, В.Г. Карпов. *ФТП*, **21** (1), 3 (1987).
- [13] S.R. Elliott. *Adv. Phys.*, **36** (2), 135 (1987).
- [14] M. Pollak. *Phys. Status Solidi B*, **230** (1), 295 (2002).
- [15] P.W. Anderson. *Phys. Rev. Lett.*, **34** (15), 953 (1975).
- [16] Д.Р. Хохлов. *УФН*, **176** (9), 983 (2006).
- [17] М.В. Красинькова, Б.Я. Мойжес. *ФТП*, **24** (11), 1934 (1990).
- [18] К.Д. Цэндин, И.А. Барыгин, А.И. Капустин, Б.П. Попов. *ЖЭТФ*, **132** (4[10]), 902 (2007).
- [19] R.A. Ogg. *Phys. Rev.*, **69** (5–6), 243 (1946).
- [20] А.А. Ликальтер. *УФН*, **170** (8), 831 (2000).
- [21] Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский. *ФТП*, **41** (11), 1317 (2007).
- [22] Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, С.Л. Поденок. *Статистическая физика полупроводников* (М., КомКнига, 2005).
- [23] H.J. Hoffmann. *Phys. Rev. B*, **23** (10), 5603 (1981).
- [24] Л.И. Шпинар, И.И. Ясковец. *ФТП*, **19** (10), 1845 (1985).
- [25] Н.А. Поклонский, А.И. Сягло, Г. Бискупски. *ФТП*, **33** (4), 415 (1999).
- [26] Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин. *ФТТ*, **40** (10), 1805 (1998).
- [27] Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин, А.Г. Забродский. *ФТТ*, **42** (3), 432 (2000).
- [28] Н.Г. Баграев, А.И. Гусаров, В.А. Машков. *ЖЭТФ*, **95** (4), 1412 (1989).
- [29] J. Singh, K. Shimakawa. *Advances in Amorphous Semiconductors* (London, CRC Press / Taylor & Francis, 2003).
- [30] N.A. Poklonski, V.F. Stelmakh, V.D. Tkachev, S.V. Voitikov. *Phys. Status Solidi B*, **88** (2), K165 (1978).
- [31] А.Г. Ждан, Н.Ф. Кухарская, Г.В. Чучева. *ПТЭ*, № 6, 77 (2004).
- [32] S.M. Sze, K.K. Ng. *Physics of Semiconductor Devices* (N.Y., Wiley, 2007).
- [33] A. Fujishima, T.N. Rao, D.A. Tryk. *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.*, **1** (1), 1 (2000).

Редактор Л.В. Шаронова

## Calculation of electrical capacitance of self-compensated semiconductors with intercenter hops of one and two electrons (on the example of silicon with radiation defects)

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

Belarusian State University,  
220030 Minsk, Belarus

\* Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Calculation of the low-frequency electrical capacity of silicon crystals at hopping migration both the single electrons and bipolarons (pair of electrons) via defects, which „stabilize“ Fermi level in the middle of the band gap has been performed. The crystals under consideration have two-level defects in three charge states (+1, 0, –1) with positive or negative correlation energies. It is shown that with increase of absolute value of external potential the capacity of silicon containing defects with positive correlation energy is increased, while for defects with negative correlation energy the capacity is decreased. The expression for drift and diffusion components of current density of bipolarons, which hop from defects in charge states (–1) to defects in charge states (+1), has been written for the first time.