

- [4] Биленко Ю. Д., Левинштейн М. Е., Попова М. В., Юферев В. С. — ФТП, 1983, т. 17, в. 10, с. 1812—1816.  
 [5] Биленко Ю. Д., Левинштейн М. Е., Юферев В. С. — ФТП, 1986, т. 20, в. 4, с. 776.  
 [6] Wierich R. L. — Electron. Lett., 1974, v. 7, N 8, p. 189—191.  
 [7] Грехов И. В., Кардо-Сысоев А. Ф., Костина Л. С., Шендерей С. В. — ЖТФ, 1981, т. 51, в. 8, с. 1709—1711.  
 [8] Грибковский В. П. — В кн.: Тез. докл. X Всес. конф. по физике полупроводников. Минск, 1985, ч. 1, с. 13—15.

Физико-технический институт  
 им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
 Ленинград

Получено 29.07.1987  
 Принято к печати 8.01.1988

ФТП, том 22, вып. 6, 1988

## МЕХАНИЗМ ОТЖИГА РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ ОБЛАСТЕЙ В КРЕМНИИ

Васильев А. В., Михнович В. В., Смагулова С. А.

Разупорядоченная область (РО) в кремнии является сложным дефектом, в поведении которого остается еще много неясного [1]. Одна из особенностей РО состоит в том, что отжиг дивакансий, составляющих ядро РО, происходит в широком температурном интервале и сдвинут в сторону более низких температур по сравнению с отжигом изолированных дивакансий в матрице кристалла [2, 3]. Это приводит соответственно к размытию и сдвигу к более низким температурам стадий изменения электрофизических характеристик при отжиге, в частности времени жизни неравновесных носителей заряда  $\tau$ , обусловленного рекомбинацией на дивакансиях.

В данной работе рассматривается характер изменений параметра  $\tau$  при отжиге дивакансий, локализованных в РО.

Качественно сдвиг температуры отжига объясняется в предположении зависимости эффективной энергии активации распада дивакансий  $E_W^*$  от механических напряжений внутри РО. Следствием механических напряжений является существование некоторого среднего гидростатического давления  $P$ . Мы полагаем, что  $E_W^* \approx E_W + P(r)v$ , где  $E_W$  — энергия активации распада изолированной дивакансии,  $v$  — объем дивакансии, расстояние  $r$  отсчитывается от центра РО. Один из возможных механизмов возникновения давления в РО рассмотрен в [4], там же получено выражение для  $P(r)$ .

Оценим сдвиг температуры  $\delta T_{\text{отж}}$  дивакансий. Представив скорость распада дивакансий в виде закона Аррениуса, найдем

$$\delta T_{\text{отж}} = T_1 - T_2 = -T_1 \frac{P(r)v}{E_W},$$

где  $T_1$  и  $T_2$  — температуры распада изолированной дивакансии и дивакансии в РО соответственно. Полагая  $T_1 \approx 550$  К,  $E_W \approx 1.5$  эВ [5] и ковалентный радиус дивакансии  $r_W$  равным двум ковалентным радиусам вакансий  $r_V \approx 2 \text{ \AA}$ , получим оценку  $\delta T_{\text{отж}}(r=0) \approx 140$  К (согласно результатам [4],  $P(r=0) = -2 \cdot 10^5$  н/см<sup>2</sup>). С увеличением  $r$   $\delta T_{\text{отж}}(r)$  уменьшается, так как уменьшается  $P(r)$  [4]. При рассмотрении изменений электрофизических характеристик в процессе отжига нужно проводить соответствующее усреднение по объему РО.

Для количественного описания изменений при изохронном отжиге величины  $\tau$  вследствие распада дивакансий необходимо рассмотреть кинетику отжига, учитывающую распад дивакансий, диффузию и дрейф вакансий, образующихся в результате распада дивакансий, а также образование дивакансий в более периферийных областях РО [где  $T_{\text{отж}}(r)$  больше] и образование А- и Е-центров (мы рассматриваем кремний  $n$ -типа). Сделаем некоторые упрощения.

Будем рассматривать температуры  $\geq 400$  К, что позволяет исключить из рассмотрения образование  $E$ -центров. Пусть концентрация кислорода  $O \geq 10^{18}$  см $^{-3}$ . Тогда, как показывают оценки, высвободившиеся вакансии идут на образование  $A$ -центров и не успевают диффундировать на периферию РО.

В результате кинетика отжига описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned} dW/dt &= -z_W(r)W(r), & dV/dt &= -k_A OV(r) + 2z_W W, \\ dA/dt &= k_A OV(r), & W(r, t=0) &= W_0(r), \\ A(r, t=0) &= A_0(r), & V(r, t=0) &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $W$ ,  $V$ ,  $A$  — концентрации дивакансий, вакансий,  $A$ -центров соответственно.  $W_0$ ,  $A_0$  — соответствующие концентрации после формирования РО (до отжига),  $k_A$  — скорость образования  $A$ -центров (определялась по данным [6]),  $z_W(r)$  — скорость отжига дивакансий. Профили  $A_0(r)$  и  $W_0(r)$  рассчитывались методом, изложенным в [7].

Решение системы (1) имеет вид

$$\begin{aligned} W(r, t) &= W_0(r) \exp[-z_W(r)t], \\ V(r, t) &= \frac{2z_W(r)W_0(r)}{k_A O - z_W(r)} \{ \exp[-z_W(r)t] - \exp(-k_A O t) \}, \\ A(r, t) &= \frac{2z_W(r)W_0(r)k_A O}{k_A O - z_W(r)} \left\{ \frac{1 - \exp[-z_W(r)t]}{z_W(r)} - \frac{1 - \exp(-k_A O t)}{k_A O} \right\}. \end{aligned} \quad (2)$$

Используя выражение для скорости рекомбинации носителей заряда на глубоких ловушках [8] и учитывая, что профили концентрации носителей заряда в электростатическом поле РО и концентрации дивакансий в РО неоднородны, получаем выражение для  $\tau$ , обусловленное рекомбинацией на дивакансиях в РО,

$$\tau^{-1} = \frac{4\pi\Delta p N_{PO}}{\Delta p} \int_0^R r^2 W(n_0 + p_0) \sum_j \frac{[f_j^W(\varphi) + f_{j-1}^W(\varphi)] \alpha_{pj}}{(n_0 e^{-\varphi/kT} + n_j) + (\alpha_{pj}/\alpha_{nj})(p_0 e^{\varphi/kT} + p_j)} dr. \quad (3)$$

Здесь  $N_{PO}$ ,  $n_0$ ,  $p_0$ ,  $n_j$ ,  $p_j$  — концентрации РО, электронов и дырок в неповрежденной матрице, электронов и дырок при совпадении уровня Ферми с  $j$ -м уровнем дивакансий,  $\Delta p$ ,  $\overline{\Delta p}$  — концентрация неравновесных дырок и средняя их концентрация по объему соответственно,  $f_j^W(\varphi(r))$  — вероятность того, что на расстоянии  $r$  от центра РО дивакансия находится в  $j$ -м зарядовом состоянии [7],  $\alpha_{pj}$ ,  $\alpha_{nj}$  — скорость захвата дырок дивакансией в  $j$ -м зарядовом состоянии и электронов в  $(j-1)$ -м зарядовом состоянии,  $\varphi(r)$  — электростатический потенциал РО,  $2R$  — расстояние между центрами соседних РО,  $\overline{\Delta p} = \frac{3}{R^3} \int_0^R \tilde{\Delta p}(r) r^2 dr$ ,

где  $\tilde{\Delta p}(r)$  — профиль концентрации неравновесных дырок в поле РО принимался таким, как в работе [7]. Оценки показывают, что при  $N_{PO} \leq 10^{12}$  см $^{-3}$   $\overline{\Delta p} = \Delta p + \delta_1$ , где  $\delta_1 \ll \Delta p$ .

Потенциал  $\varphi(r)$  определяется из уравнения Пуассона

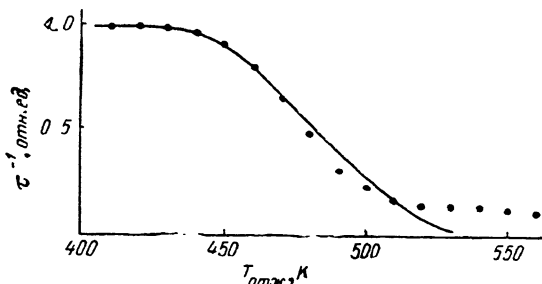
$$\Delta \varphi(r) = -\frac{4\pi}{\varepsilon} \rho(r), \quad \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad \varphi(r) \Big|_{r=\infty} = 0. \quad (4)$$

В плотность заряда  $\rho(r)$  входит заряд, локализованный на свободных носителях, атомах легирующей примеси, дефектах (в данном случае на вакансиях, дивакансиях,  $A$ -центрах).

Для исследования изменений при изохронном отжиге величины  $\tau$  выбирались температурный  $T_i - T_{i-1}$  и временной  $t_i - t_{i-1}$  шаги 15 К и 15 мин соответственно. По соотношениям (2) определялась концентрация дефектов на каждом шаге термообработки ( $t_i$ ,  $T_i$ ), а затем с найденными профилями концентраций дефектов решалось численно уравнение (4) и определялось значение  $\tau$ . Решения уравнения (4) и расчеты  $\tau$  осуществлялись для температуры измерения 300 К. Количественные расчеты изменений  $\tau^{-1}$  с температурой отжига для

материала КЭФ-1 представлены на рисунке. Аналогичные зависимости будут наблюдаться для кремния с другим содержанием легирующей примеси.

Для проверки изложенной модели был проведен отжиг образцов кремния КЭФ-1, содержащих РО. Образцы облучались нейтронами реактора при температуре, близкой к комнатной. Доза быстрых нейтронов составляла  $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ . Концентрация электронов в зоне проводимости после облучения изменилась незначи-



Изменения  $\tau^{-1}$  при изохронном отжиге после нейтронного облучения.

Материал КЭФ-1. Сплошная кривая — расчет, точки — эксперимент.

тельно (измерения по эффекту Холла). Величина  $\tau$  измерялась по сигналу стационарной фотопроводимости при возбуждении в собственной полосе. Как видно из рисунка, в области  $T_{отж}$  до  $\sim 520 \text{ K}$  экспериментальные и расчетные данные находятся в удовлетворительном согласии. Расхождение при более высоких температурах отжига обусловлено наличием в облученных образцах других радиационных дефектов (кроме дивакансий), не учтенных в расчете.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Вопросы радиационной технологии полупроводников / Под ред. Л. С. Смирнова. Новосибирск, 1980. 294 с.
- [2] Cheng L. J., Lori J. — Phys. Rev., 1968, v. 171, N 3, p. 856—862.
- [3] Newman R. C., Totterdell D. H. J. — J. Phys. C: Sol. St. Phys., 1975, v. 8, N 12, p. 3944—3954.
- [4] Михнович В. В. — ФТП, 1984, т. 18, в. 9, с. 1670—1673.
- [5] Kimerling L. C. — In: Rad. Eff. Semicond. Conf. Ser. N 31. London—Bristol, 1977, p. 221—230.
- [6] Кожевников В. П., Михнович В. В. — ЖТФ, 1981, т. 51, в. 1, с. 153—156.
- [7] Кожевников В. П., Михнович В. В. — ЖТФ, 1983, т. 53, в. 7, с. 1361—1367.
- [8] Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. М., 1977. 672 с.

Институт физики полупроводников  
СО АН СССР  
Новосибирск

Получено 15.10.1986  
Принято к печати 14.01.1988

ФТП, том 22, вып. 6, 1988

## БЕЗЫНЕРЦИОННАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ВАЛЕНТНОГО ПОЛУПРОВОДНИКА ЛОКАЛИЗОВАННЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ВОЗБУЖДЕНИЕМ

Бутько В. Г., Гусев А. А.

Квазимолекулярная модель валентных полупроводников [1], в которой основными структурными элементами являются двухэлектронные валентные связи (квазимолекулы) между ближайшими атомами, позволяет изучать как основное, так и возбужденные состояния кристалла. Если для основного состояния расчетные характеристики хорошо согласуются с экспериментом [2], то для дырочных зон [3], и в особенности для возбужденных состояний типа экситонов Френкеля, количественные характеристики не могут считаться удовлетворительными [4]. Это связано с узостью базисного набора функций и с большой степенью локализации возбужденных состояний, построенных с его по-