

- [10] Воронкова А. В., Калинушкин В. П., Мурина Т. М., Сысоева Н. С. — ФТП, 1985, т. 19, в. 10, с. 1902—1904.
- [11] Воронков В. В., Воронкова Г. И., Калинушкин В. П., Мурина Т. М., Петрова Е. А., Плоппа М. Г., Прозумент Э. Б., Соловьев А. Б. — ФТП, 1984, т. 18, в. 12, с. 2222—2224.
- [12] Воронков В. В., Воронкова Г. И., Даненгириш С. Г., Зубов Б. В., Калинушкин В. П., Мурина Т. М., Петрова Е. А., Прохоров А. М., Строкан Н. Б., Чикалова-Лузина О. П. — ФТП, 1982, т. 16, в. 10, с. 1752—1758.
- [13] Воронкова Г. И., Воронков В. В., Головина В. Н., Денисова Л. А., Александрова Г. И. — В кн.: Науч. тр. Гиредмета. М., 1974, т. 66, с. 143—146.

Институт общей физики АН СССР
Москва

Получено 14.09.1987
Принято к печати 5.01.1988

ФТП, том 22, вып. 7, 1988

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ СЕРОЙ НА ОБРАЗОВАНИЕ ГЛУБОКИХ ЦЕНТРОВ В n -InP ПРИ ОБЛУЧЕНИИ

Кольченко Т. И., Ломако В. М., Мороз С. Е.

Вопрос о взаимодействии первичных радиационных дефектов (РД) с примесями является одним из важнейших в радиационной физике полупроводников. Хорошо известно, что в кремнии и германии мелкие легирующие примеси активно взаимодействуют с первичными РД (вакансиями или междоузлиями), в результате чего образуются комплексы, ответственные за изменение свойств материала [1]. Систематические исследования РД в InP начались сравнительно недавно, и объем информации о влиянии примесей на процессы дефектообразования в этом материале пока весьма ограничен. Было обнаружено, что эффективность введения глубоких центров при облучении существенно уменьшается при увеличении концентрации цинка [2] и кремния [3], являющихся примесями замещения в подрешетке индия. Представляло интерес выяснить влияние примесей замещения в подрешетке фосфора на дефектообразование в InP.

В настоящей работе с помощью метода нестационарной емкостной спектроскопии глубоких уровней (НЕСГУ) изучалось влияние легирования серой на эффективность образования электронных ловушек в InP при облучении. Структуры с барьером Шоттки на основе эпитаксиальных пленок InP<S> толщиной ~ 10 мкм ($n_0 = 8 \cdot 10^{14} \div 6 \cdot 10^{17}$ см⁻³) облучались γ -квантами ⁶⁰Co при 40 °С; интенсивность потока частиц составляла $\sim 10^{12}$ см⁻²·с⁻¹.

Спектр НЕСГУ облученных легированных структур был идентичен приведенному в [4] для специально не легированных структур и при потоках $\Phi > > 10^{17}$ см⁻² включал три основных пика $E1$, $E4$ и $E5$, характеризующихся значениями энергий активации эмиссии 0.20, 0.4 и 0.60 эВ соответственно. Пик $E1$ соответствовал одному из уровней многозарядного конфигурационно-бистабильного дефекта, называемого M -центром [5]. При измерениях M -центр всегда находился в A -конфигурации [4, 5]. В результате γ -облучения концентрации ловушек $E1$, $E4$, $E5$ возрастали линейно с потоком облучения $\Phi \leq 10^{19}$ см⁻². Зависимости скоростей введения центров от уровня легирования серой представлены на рис. 1. Видно, что при легировании слоев до $n_0 = 6 \cdot 10^{17}$ см⁻³ скорость введения основного центра $E5$ медленно возрастает, а скорость введения $E4$ практически не изменяется. Поскольку при увеличении концентрации серы на 3 порядка скорость введения ловушек возрастала не более чем в 1.5 раза, можно заключить, что атомы серы, по всей вероятности, не входят в состав дефектов, наблюдаемых методом НЕСГУ. В отличие от случая легирования серой при увеличении концентрации кремния в n -InP от $5 \cdot 10^{15}$ до $2 \cdot 10^{17}$ см⁻³ наблюдалось уменьшение скорости введения электронных и дырочных ловушек на 1—2 порядка величины [3]. В частности, уровень с $E_a = 0.64$ эВ, соответствующий ловушке $E5$, при $n_0 = 1 \cdot 10^{17}$ см⁻³ вообще не проявлялся в спектрах НЕСГУ,

хотя при низкой концентрации примеси кремния он являлся доминирующим. Авторы [3] предположили, что атомы Si в InP действуют как центры аннигиляции первичных РД, вследствие чего эффективность дефектообразования уменьшается с ростом $N(\text{Si})$. Сера, замещающая элемент V группы (фосфор), по-видимому, не может играть аналогичную роль. Таким образом, сопоставление полученных данных с результатами работы [3] свидетельствует о существенном влиянии типа легирующей донорной примеси на процессы радиационного дефектообразования в InP.

Рассмотрим более подробно влияние уровня легирования на скорость введения M -центра (пик $E1$). Из рис. 1 (кривая 3) видно, что при $n_0 > 10^{16} \text{ см}^{-3}$ происходит ступенчатое уменьшение скорости введения M -центра примерно в 2 раза. Тот факт, что изменение величины $dN/d\Phi$ происходит в узком интервале изменения концентрации электронов, дает основания предположить, что скорость введения M -центра зависит от зарядового состояния некоторого дефекта X с уровнем $E_c - 0.12 \text{ эВ}$ (рис. 1). Если это предположение справедливо,

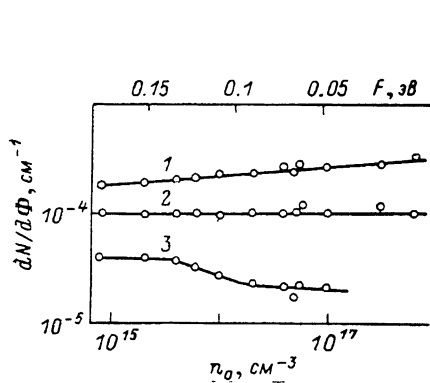


Рис. 1. Зависимость скорости введения глубоких центров в облученном γ -квантами ^{60}Co n -InP от уровня легирования серой и положения уровня Ферми при температуре облучения.

1 — $E5$ ($E_a = 0.60 \text{ эВ}$), 2 — $E4$ ($E_a \approx 0.4 \text{ эВ}$), 3 — $E1$ (M -центр).

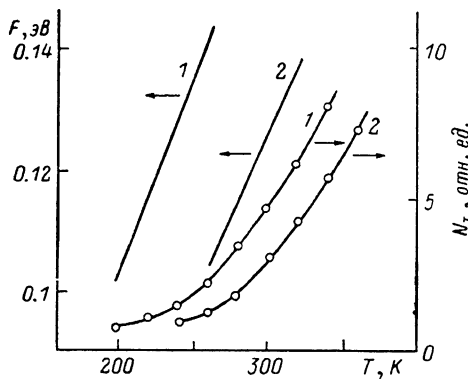


Рис. 2. Возрастание концентрации M -центра (N_T) при изохронном (5 мин) отжиге образцов n -InP, облученных альфа-частицами ^{210}Po при 130 К, а также зависимость положения уровня Ферми (F) от температуры отжига.

Концентрация электронов $n_0, \text{ см}^{-3}$: 1 — $8 \cdot 10^{14}$, 2 — $4 \cdot 10^{16}$.

то в образцах с $n_0 < 8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ можно ожидать уменьшения скорости введения M -центра при понижении температуры облучения. Действительно, как видно из рис. 2, непосредственно после контрольного облучения альфа-частицами при $T = 130 \text{ К}$ M -центр практически отсутствовал и начинал формироваться только при нагревании облученных образцов выше 200 К. Следует отметить, что начало роста концентрации M -центра в образцах с разной концентрацией электронов с точностью до kT коррелирует с пересечением уровнем Ферми уровня $E_c - 0.12 \text{ эВ}$. Этот факт согласуется со сделанным выше предположением о влиянии зарядового состояния дефекта с уровнем $E_c - 0.12 \text{ эВ}$ на вероятность образования M -центра. Уровень $E_c - 0.12 \text{ эВ}$ может принадлежать дефекту как радиационной, так и остаточной природы, который при взаимодействии с другими дефектами или примесями образует более сложный по структуре M -центр. Другая возможность заключается в распаде комплекса, имеющего общую с M -центром компоненту, при изменении заполнения уровня $E_c - 0.12 \text{ эВ}$. Для выяснения природы дефекта X необходимы дальнейшие исследования.

Представленные экспериментальные результаты позволяют заключить, что легирование InP серой до $n_0 = 6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ в отличие от случая легирования кремнием не оказывает существенного влияния на эффективность образования электронных ловушек при облучении. Наблюдаемое уменьшение скорости введения конфигурационно-бистабильного M -центра в образцах с $n_0 > 10^{16} \text{ см}^{-3}$ объясняется изменением заполнения уровня $E_c - 0.12 \text{ эВ}$, принадлежащего неизвестному дефекту X .

- [1] Емцев В. В., Машовец Т. В. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках. М., 1981. 248 с.
- [2] Yamaguchi M., Ando K. — J. Appl. Phys., 1986, v. 60, N 3, p. 935—940.
- [3] Ando K., Yamaguchi M., Uemura S. — J. Appl. Phys., 1984, v. 55, N 12, p. 4444—4446.
- [4] Кольченко Т. И., Ломако В. М., Мороз С. Е. — ФТП, 1987, т. 21, в. 6, с. 1075—1078.
- [5] Levinson M., Benton J. L., Kimerling L. C. — Phys. Rev. B, 1983, v. 27, N 10, p. 6216—6221.

Научно-исследовательский институт
прикладных физических проблем
им. А. Н. Севченко при БГУ им. В. И. Ленина
Минск

Получено 3.11.1987
Принято к печати 5.01.1988

ФТП, том 22, вып. 7, 1988

КЛАСТЕРНЫЙ РАСЧЕТ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ КИСЛОРОДА В КРЕМНИИ

Филипенко Л. А., Коротеев Ю. М.

Известно, что термообработка кристаллов кремния, содержащих кислород в концентрации 10^{17} — 10^{18} см⁻³, способствует образованию различных связанных состояний кислорода. При нагревании до температуры 450 °С в течение нескольких часов образуются дефекты, изменяющие электрическую проводимость кристалла, названные термодонорами. Предполагается, что термодонорами являются кремниво-кислородные комплексы, имеющие низкий потенциал ионизации. Выяснению кинетики образования и структуры данного дефекта посвящены многие экспериментальные и теоретические работы, но полного понимания в этом вопросе до сих пор не достигнуто.

В настоящей работе проводится кластерный расчет связанных состояний кислорода в кремнии полуэмпирическим квантово-химическим методом ППДП/2 (поглоное пренебрежение дифференциальным переключением) [1] с использованием параметризации Бойда—Уайтхеда [2]. Молекулярный кластер содержит 18 атомов кремния и построен так, что можно выделить центральный атом кремния и две координационные сферы вокруг него. Это позволяет рассматривать перераспределение заряда вокруг дефекта, расположенного в центре не только на ближайших соседних атомах, но и на вторых соседях. Твердотельное окружение воспроизводится 36 атомами водорода, расположенными на расстоянии 1.493 Å. Длина связи Si—H равна 2.347 Å, все углы связей тетраэдрические.

Для кремниво-кислородного комплекса рассматривались конфигурации, показанные на рисунке: *a* — ирид (расщепленное междуузлие), *b* — пирамидальный ирид, *c* — междуузельный кислород, *d* — трехатомный кислородный комплекс, один атом которого образует расщепленную конфигурацию (ирид), а два находятся на поддерживающих связях. Такие связанные состояния кислорода, как *a*—*c*, исследовались в работах [3, 4]. Отметим, что мы рассматриваем расщепленную конфигурацию, сдвинутую к центру кластера. В [3] атом кислорода располагался в одной плоскости с атомами Si₂, Si₃. Кластерный расчет в [3, 4] проводился для очень малого кластера Si5OH12 и были получены противоречивые результаты. В [3] вычислялась полная энергия кластера с дефектом в конфигурациях *a* и *c* и сделан вывод о том, что наиболее стабильной является междуузельная конфигурация, в то время как конфигурация ирида представляет собой промежуточную стадию диффузии атомов кислорода, поскольку разность энергий кластеров составила 2.9 эВ, что приблизительно совпало с энергией активации диффузии 2.54 эВ. В [4], наоборот, было получено, что минимальной энергией обладает кластер, содержащий ирид, и была предложена еще одна кон-