

Исследование энергетического спектра кристаллов Si : Mg методом DLTS

© Н.А. Ярыкин¹, В.Б. Шуман², Л.М. Порцель², А.Н. Лодыгин²,
Ю.А. Астров^{2,¶}, Н.В. Абросимов³, J. Weber⁴

¹ Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук, 142432 Черноголовка, Россия

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

³ Leibniz Institute for Crystal Growth, D-12489 Berlin, Germany

⁴ Technische Universität Dresden, D-01062 Dresden, Germany

¶ E-mail: yuri.astrov@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 25 декабря 2018 г.

В окончательной редакции 29 декабря 2018 г.

Принята к публикации 29 декабря 2018 г.

Электрически активные центры в легированных магнием кристаллах кремния *n*-типа изучались методом релаксационной спектроскопии глубоких уровней (DLTS). Магний вводился путем диффузии из металлической пленки на поверхности при 1100°C. Обнаружено, что в спектре DLTS доминируют два уровня с близкой концентрацией $\sim 6 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, что приблизительно соответствует концентрации межузельного магния (Mg_i), ожидаемой из условий диффузии и литературных данных по эффекту Холла. Зависимость скорости эмиссии электронов с этих уровней от напряженности электрического поля качественно соответствует эффекту Пула–Френкеля, указывая на донорную природу обоих уровней, хотя абсолютная величина эффекта отличается от теоретической. Энергии активации этих уровней, полученные путем экстраполяции скоростей эмиссии, измеренных при разных температурах, на нулевое поле, составляют 112 и 252 мэВ, что в пределах ошибки совпадает с энергиями основных состояний первого и второго донорных уровней Mg_i , определенных ранее по оптическому поглощению. Таким образом показано, что при использовании высококачественного исходного материала и выбранного режима диффузии доминирующими центрами с уровнями в верхней половине запрещенной зоны являются межузельные атомы магния.

DOI: 10.21883/FTP.2019.06.47732.9054

1. Введение

Известно, что примесь магния вводит в кремний глубокие двойные доноры [1], которые представляют интерес с точки зрения создания источников терагерцового излучения и развития технологии квантовых вычислений. Обычно магний вводится путем диффузии из металлической пленки на поверхности при температурах 1100–1400°C. Исследования спектров оптического поглощения таких образцов выявили две серии линий, которые хорошо описываются теорией эффективной массы для нейтральных и однократно заряженных доноров с уровнями основных состояний $E_c - 107.5$ мэВ и $E_c - 256.5$ мэВ соответственно, где E_c — энергия дна зоны проводимости [2–4]. Расщепление линий поглощения под действием одноосного сжатия, а также спектры ЭПР соответствуют центрам с тетраэдрической симметрией [2,5]. Таким образом, вся совокупность данных указывает на то, что атом магния в тетраэдрическом междоузлии (Mg_i) формирует двойной донор с указанными уровнями.

Кроме доминирующих линий Mg_i , в спектрах оптического поглощения выявляется ряд более мелких доноров [4–7]. Отметим, в частности, двойной донор Mg_{i*} с

уровнями, близкими к Mg_i ($E_c - 94.4$ и $E_c - 213.8$ мэВ), который обладает более низкой симметрией, соответствующей смещению атома магния из тетраэдрического междоузлия, возможно, из-за взаимодействия с неизвестной фоновой примесью [4,5].

Результаты измерений эффекта Холла на аналогичных образцах согласуются с данными по оптическому поглощению и позволяют определить концентрацию связанных с магнием центров. Зависимость положения уровня Ферми от температуры хорошо описывается моделью донора с уровнями, указанными выше для Mg_i , и концентрацией в диапазоне $(0.5-3) \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ в зависимости от условий диффузии. Измерения эффекта Холла в Si : Mg выявляют также присутствие небольшой концентрации более мелких доноров [7–9].

Методом атомно-абсорбционной спектроскопии было установлено, что Mg_i -центры составляют только малую часть от полной концентрации магния в кристалле [10]. Кроме того, донорные уровни Mg_i нестабильны и исчезают в процессе отжига при температурах намного ниже температуры диффузии [7,11]. В каком состоянии находится основная часть магния, и связана ли с ней какая-либо электрическая активность в настоящее время неизвестно. Поэтому требуется информация о спектре

уровней во всей запрещенной зоне, что в принципе может быть сделано методом нестационарной спектроскопии глубоких уровней (DLTS).

К настоящему времени имеется всего несколько публикаций, посвященных изучению центров магния в кремнии *n*-типа с использованием методики DLTS [12–14]. Хотя результаты этих работ демонстрируют существенный разброс, можно выделить три группы уровней с энергиями активации в диапазонах 0.18–0.25, 0.37–0.40 и 0.54–0.64 эВ. Первая группа может быть связана со вторым донорным уровнем Mg_i, вторая близка к уровню $E_c - 0.40$ эВ, обнаруженному в компенсированном Si : Mg по эффекту Холла [15], тогда как близкие к середине запрещенной зоны уровни третьей группы наблюдались только методом DLTS. Отметим, что использование нестабильных изотопов Mg позволило установить, что центры с уровнями 0.22, 0.37, 0.54 и 0.64 эВ включают в свой состав один атом магния [14].

В настоящей работе метод DLTS применяется для исследования энергетического спектра уровней в кремнии, легированном магнием. Важно отметить, что диффузия магния проводилась в высококачественный исходный материал с применением тех же технологических режимов, которые использовались ранее при изготовлении образцов для оптических и электрических измерений [4,8,9].

2. Методика эксперимента

В работе использовались бездислокационные монокристаллы кремния *n*-типа, выращенные методом бесстигельной зонной плавки и легированные фосфором ($\rho = 0.5 \text{ Ом} \cdot \text{см}$). Диффузионное легирование магнием осуществлялось с помощью так называемого „сэндвич“ метода, суть которого в том, что образец, обе поверхности которого покрыты пленкой магния, зажимается между двумя вспомогательными пластинами кремния [1]. Детальное описание нашей реализации этой методики дано в работах [9,16]. Диффузия проводилась при температуре 1100°C в течение 2.5 ч в запаянных кварцевых ампулах в атмосфере аргона. Данные по температурной зависимости коэффициента диффузии магния в бездислокационном кремнии показывают, что выбранный режим легирования дает практически однородное по глубине распределение примеси [9]. По окончании диффузии ампула с образцами охлаждалась в потоке азота. Согласно предыдущим исследованиям эффекта Холла на кристаллах, которые в исходном состоянии были близки к собственным, такие условия диффузии обеспечивают введение $\sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$ центров Mg_i [9].

Полученные таким образом образцы Si : Mg подвергались механической шлифовке и химическому травлению в смеси кислот (HF + HNO₃ + CH₃COOH). Диоды Шоттки для емкостных измерений изготавливались термическим напылением золота в вакууме через маску с отверстиями диаметром 1 мм. Непосредственно перед

напылением золота все образцы промывались последовательно в 10% растворе HF и деионизированной воде.

Вольт-фарадные (CV) характеристики диодов измерялись на частоте 1 МГц, причем величина емкости корректировалась на последовательное сопротивление контакта и базы диода, которое определялось из активной составляющей высокочастотной проводимости. Спектр ловушек основных носителей заряда характеризовался методом релаксационной спектроскопии глубоких уровней (DLTS). Показанные далее спектры DLTS нормированы таким образом, что одинаковая амплитуда пиков приблизительно соответствует одинаковой концентрации центров. Количественно концентрация глубоких уровней и их распределение по глубине определялись из серии изотермических измерений при фиксированном обратном смещении и изменяющемся напряжении заполняющего импульса.

Метод Лаплас-DLTS (LDLTS) [17] был применен для количественной характеристики зависимостей скорости эмиссии носителей заряда от температуры и величины электрического поля. В этом случае всегда анализировался разностный сигнал между двумя релаксациями емкости, измеренными при одинаковом обратном смещении и двух разных по амплитуде уровнях напряжений во время заполняющих импульсов. Путем фиксации этих напряжений выбирался постоянный слой на некотором расстоянии от диода Шоттки. Для уменьшения вариации электрического поля внутри этого слоя он выбирался как можно более узким, но достаточной ширины для получения приемлемого соотношения сигнал–шум. Электрическое поле внутри исследуемого слоя варьировалось путем изменения квазистационарного обратного смещения.

3. Результаты и обсуждение

Характерные спектры DLTS приведены на рис. 1. Две кривые отличаются условиями измерения: спектр 1 измерен в объеме образца (постоянное обратное смещение $V_r = 6 \text{ В}$, напряжение во время заполняющего импульса $V_p = 2 \text{ В}$), спектр 2 — ближе к поверхности ($V_r/V_p = 2/0 \text{ В}$). Из CV-характеристик следует, что вклад в показанные спектры DLTS вносят центры, расположенные на глубинах 0.45–0.75 и 0.2–0.45 мкм соответственно. В обоих спектрах доминируют два пика, обозначенные $E1$ и $E2$. Основываясь на их температурном положении и на литературных данных об уровнях в Si : Mg, можно предположить что пики $E1$ и $E2$ обусловлены выбросом электронов с первого и второго донорных уровней Mg_i соответственно.

Видно, что амплитуда пика $E2$ существенно меньше в приповерхностной области (пунктирная кривая), что может быть связано с пассивацией водородом, который вводится в процессе химического травления [18,19]. Слабый сигнал $E4$ наблюдается только в приповерхностной области и может определяться комплексом водорода.

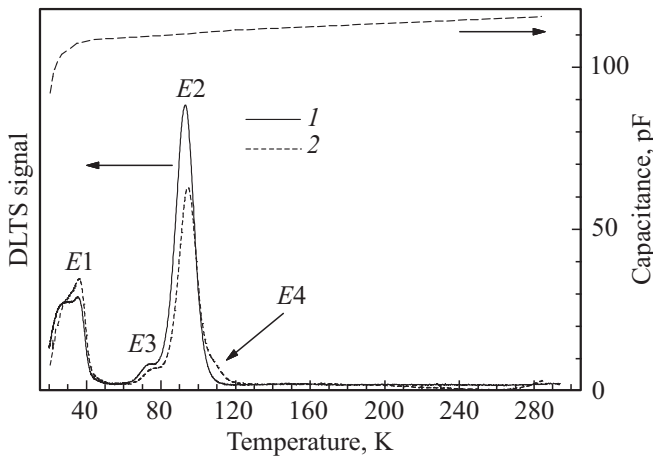


Рис. 1. Спектры DLTS в n -Si: Mg, измеренные при различных значениях обратного смещения и заполняющих импульсов в объеме образца (1) и ближе к поверхности (2) (см. текст). Скорость эмиссии электронов в максимуме пиков 49 с^{-1} . В верхней части пунктирной линией показан температурный ход емкости обратносмещенного диода (6 В) в процессе DLTS измерений (правая шкала).

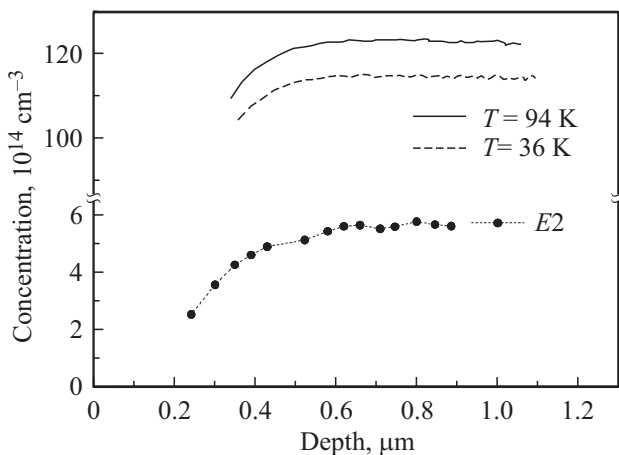


Рис. 2. Вверху: концентрационные профили суммарной концентрации доноров, вычисленной из CV -характеристик, измеренных при указанных температурах. Внизу: концентрация уровня $E2$, измеренная методом DLTS.

Малая концентрация $E4$ не позволяет сказать что-либо определенное о природе его прекурсора. Напротив, центры, обуславливающие плечо $E3$, распределены достаточно равномерно по глубине. Сложная форма пика $E1$ и его амплитуда будут обсуждаться далее.

Профили по глубине для суммарной концентрации доноров, вычисленной из CV -характеристик, и для концентрации уровня $E2$, измеренной методом DLTS, показаны на рис. 2. Видно, что на глубинах $\geq 0.5 \text{ мкм}$ все профили выходят на постоянный уровень, в частности, концентрация уровня $E2$ составляет $5.7 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Так как в процессе изготовления диода Шоттки был стравлен достаточно толстый слой ($\sim 30 \text{ мкм}$), эти уровни

соответствуют концентрации дефектов в объеме кристалла. Заметим, что концентрация уровня $E2$ близка к той, которая ожидалась для Mg_i , исходя из условий диффузии и измерений эффекта Холла [9]. Спад суммарной концентрации доноров в приповерхностной области определяется, в основном, пассивацией фосфора водородом, проникающим из кислотного раствора при химическом травлении [18]. Более чем двукратное уменьшение концентрации $E2$ также, очевидно, связано с процессом изготовления диода Шоттки.

На рис. 2 видно, что суммарная концентрация доноров, измеренная при $T = 36 \text{ К}$ ниже, чем при $T = 94 \text{ К}$. Это ожидаемый результат, так как уровень $E2$ остается заполненным электронами в процессе низкотемпературных CV -измерений. Однако измеренное уменьшение концентрации доноров оказалось на $\sim 30\%$ больше, чем концентрация уровня $E2$. Поэтому необходимо проанализировать применимость емкостных методов при таких низких температурах.

Концентрация электронов в зоне проводимости при $T = 36 \text{ К}$ и данном легировании фосфором составляет всего $\sim 8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$. В этом случае сопротивление базы нашего диода Шоттки $\sim 1 \text{ кОм}$, что сравнимо с емкостным импедансом слоя объемного заряда при нулевом смещении. Так как разделение активной и реактивной составляющих импеданса не идеально, измеряемая величина емкости несколько меньше реальной. По этой же причине концентрация уровня $E1$, вычисленная из амплитуды релаксации емкости при $T = 36 \text{ К}$, также на $\sim 30\%$ ниже, чем концентрация $E2$. Тем не менее мы полагаем, что измерения скорости эмиссии электронов можно проводить и при более низких температурах, так как резкое падение емкости обратносмещенного диода происходит только при $\sim 25 \text{ К}$ (пунктирная кривая в верхней части рис. 1).

Характерные спектры LDLTS приведены на рис. 3. Видно, что эмиссия электронов со всех уровней существенно ускоряется даже при небольшом увеличении относительно слабого электрического поля. Это согласуется с предполагаемой донорной природой $E1$ и $E2$, для которых должен проявляться эффект Пула–Френкеля [20]. Вариация электрического поля внутри анализируемого объема приводит к эффективному размытию энергии уровня и неэкспоненциальной релаксации емкости, что проявляется в необычайно большой ширине пиков LDLTS. Пики LDLTS в высокочастотной области на рис. 3, a могут быть связаны с донорными уровнями, которые наблюдались во многих работах в дополнение к уровням Mg_i [4,7,9]. Наличие такой высокочастотной составляющей релаксации объясняет низкотемпературное плечо пика $E1$ на рис. 1. Следует отметить, однако, что достоверность высокочастотных пиков LDLTS ниже обычной, что следует из выходных параметров математических процедур, которые преобразуют измеренную релаксацию в частотный спектр.

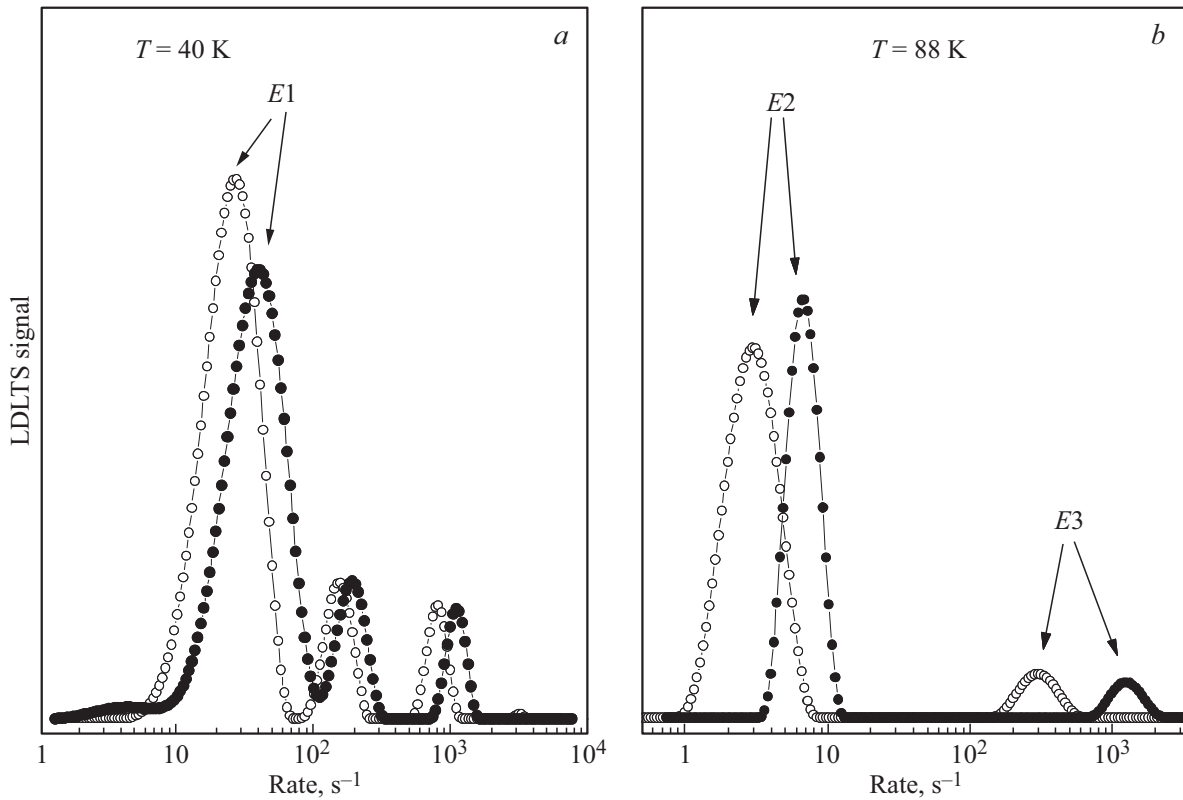


Рис. 3. Спектры LDLS в *n*-Si : Mg: *a* — $T = 40$ К, напряженность электрического поля $\epsilon = 1.5$ (пустые символы) и 1.7 В/мкм (залитые символы); *b* — $T = 88$ К, $\epsilon = 2.5$ (пустые символы) и 3.9 В/мкм (залитые символы).

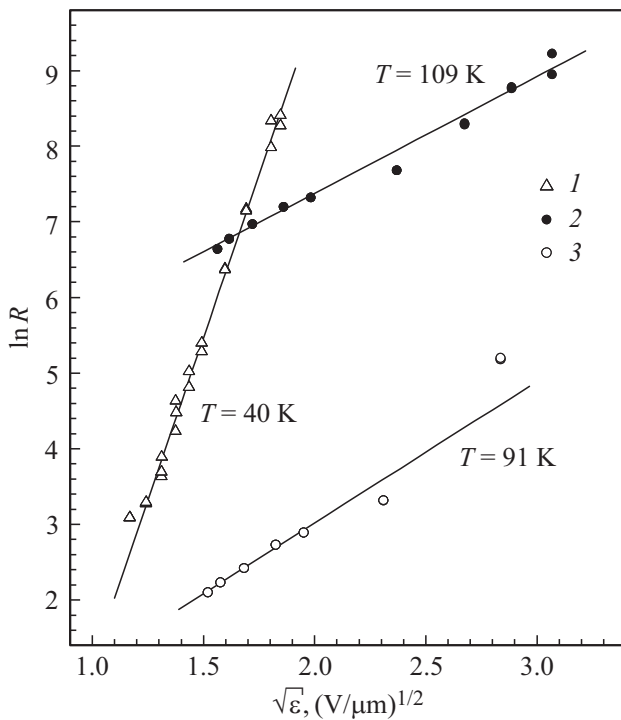


Рис. 4. Скорости эмиссии электронов с уровня *E1* при температуре 40 К (1) и с уровня *E2* при 109 (2) и 91 К (3) в зависимости от напряженности электрического поля. Прямые — подгонка линейной зависимостью в использованных координатах.

Рассчитанные теоретически (уравнение (1)) и экспериментально измеренные наклоны S прямых на рис. 4

$T, \text{ K}$	Уровень	Z	S_{theor}	S_{exper}
40	<i>E1</i>	1	6.40	8.62
91	<i>E2</i>	2	3.98	1.90
109	<i>E2</i>	2	3.32	1.54

Метод LDLS был применен для количественной характеристики зависимостей скорости эмиссии электронов с уровнями *E1* и *E2* от величины электрического поля (рис. 4). Видно, что все зависимости близки к линейным в координатах $\ln R(\sqrt{\epsilon})$, где R — скорость эмиссии, а ϵ — напряженность электрического поля. Таким образом, эмиссия с обоих центров проявляет эффект Пула–Френкеля (ПФ), что для материала *n*-типа свидетельствует о донорной природе центров.

Механизм ПФ предполагает также определенную абсолютную величину эффекта, которая выражается в наклоне S прямых на рис. 4. Простая теория [20] предсказывает, что

$$S = \frac{2q}{kT} \sqrt{\frac{qZ}{\epsilon}}, \tag{1}$$

где q — элементарный заряд, ϵ — диэлектрическая проницаемость материала и Z — кратность донора. Величи-

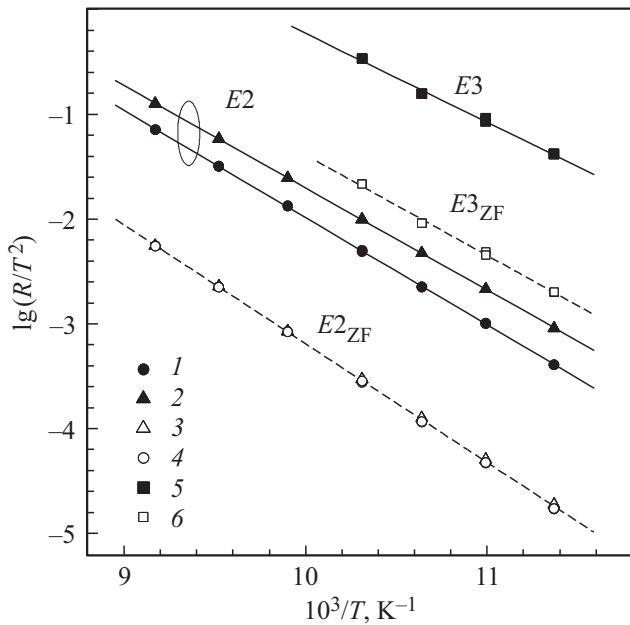


Рис. 5. Экспериментальные (1, 2, 5) и экстраполированные к нулевому полю (3, 4, 6) зависимости Аррениуса для скорости эмиссии электронов с уровней $E2$ (1–4) и $E3$ (5, 6). Средняя напряженность электрического поля в исследуемом слое 2.5 (1), 4.0 (2) и 3.9 В/мкм (5). Прямые — подгонка методом наименьших квадратов.

ны S , как вычисленные по этой формуле, так и определенные экспериментально, приведены в таблице. Видно, что для уровня $E2$ ($Z = 2$) экспериментальные наклоны составляют в обоих случаях $\sim 47\%$ от теоретических. Такой заниженный (по сравнению с простой одномерной теорией) наклон часто встречается в литературе (например, [21]), что послужило причиной многочисленных попыток уточнения теории (например, [22,23]), основанных, в основном, на учете анизотропии энергетического барьера во внешнем электрическом поле. В то же время наклон для уровня $E1$ существенно превышает теоретический, о чем, насколько нам известно, не сообщалось в литературе. Для дальнейшего важно, однако, что теоретически предсказанное постоянство произведения $S \cdot T$ (уравнение 1) выполняется для уровня $E2$ с точностью $\sim 3\%$ (см. таблицу).

Температурные зависимости скорости эмиссии электронов со всех обнаруженных центров измерялись методом LDLTS. Данные для уровней $E2$ и $E3$ показаны на рис. 5. Для уровня $E2$ зависимости Аррениуса были измерены при двух напряженностях электрического поля, указанных в подписи к рис. 5. Как и следовало ожидать, для центров, проявляющих эффект Пула–Френкеля, кажущаяся энергия активации уровня $E2$ зависит от электрического поля. Для данных 1 и 2 на рис. 5 получаем 195 и 204 мэВ с ошибкой 2–3 мэВ, определяемой разбросом точек.

Для сравнения с результатами, полученными по оптическому поглощению и эффекту Холла, надо определить

энергию активации в нулевом поле. Для уровня $E2$ непосредственная экстраполяция могла быть выполнена только для температур 91 и 109 К, для которых полевая зависимость была измерена в явном виде (рис. 4). Однако установленное выше постоянство произведения $S \cdot T$ (см. таблицу) дает возможность пересчитать на нулевое поле и точки, измеренные при других температурах. Правомочность такого подхода подтверждается тем, что точки, измеренные при разных электрических полях, приводят к одной и той же величине скорости эмиссии в нулевом поле (точки 3 и 4 на рис. 5). Пунктирная линия, проведенная по этим точкам, соответствует энергии активации $E_a = 226 \pm 4$ мэВ и сечению захвата электронов $\sigma = 1.6 \cdot 10^{-14} \text{ см}^{-2}$.

Следует отметить, что эти величины получены в предположении о независимости сечения захвата от температуры (см. ось ординат на рис. 5). Однако известно, что для притягивающего кулоновского центра $\sigma \propto T^{-3}$ [24]. С учетом этого обстоятельства получаем $E2 = E_c - 252$ мэВ. Аналогичный подход к эмиссии с уровня $E1$, но с использованием $S \cdot T$ из первой строки таблицы, приводит к оценке энергетического положения $E1$ на 112 ± 6 мэВ ниже дна зоны проводимости.

Сигнал $E3$ хорошо разрешается в спектрах LDLTS, что дает возможность определить энергию активации электронов с этого уровня. Точки 5 на рис. 5 измерены при фиксированной напряженности электрического поля 3.9 В/мкм. Хотя зависимость $R(\sqrt{\mathcal{E}})$ для уровня $E3$ подробно не исследовалась, на рис. 3, *b* видно, что эмиссия электронов с уровня $E3$ ускоряется аналогично тому, как это происходит для уровня $E2$. Поэтому для экстраполяции скорости эмиссии на нулевое поле использовалась величина $S \cdot T$, измеренная для близкого уровня $E2$. Полученная таким образом пунктирная прямая 6 на рис. 5 соответствует $E_a = 192 \pm 5$ мэВ. Коррекция для притягивающего центра дает положение уровня $E3$ на 215 мэВ ниже дна зоны проводимости, что практически совпадает со вторым донорным уровнем Mg_{i^*} [4]. Если эта идентификация правильная, то применение метода DLTS позволило впервые оценить концентрацию центров Mg_{i^*} , которых, как следует из амплитуды сигналов LDLTS, примерно в 10 раз меньше, чем $E2$.

4. Заключение

Показано, что в кристаллах кремния, легированных Mg при температуре 1100°C, методом DLTS выявляются два доминирующих уровня в верхней половине запрещенной зоны, $E1$ и $E2$. Скорость эмиссии электронов с обоих центров экспоненциально зависит от квадратного корня из напряженности электрического поля, т.е. наблюдается эффект Пула–Френкеля, характерный для донорных уровней в кристаллах n -типа. По зависимости Аррениуса скорости эмиссии, экстраполированной к нулевому полю, и с учетом температурной зависимости сечения захвата на притягивающий центр определено,

что уровни $E1$ и $E2$ располагаются на 112 ± 6 мэВ и 252 ± 4 мэВ ниже дна зоны проводимости соответственно. Эти величины в пределах ошибки совпадают с энергиями основных состояний первого и второго донорных уровней междоузельного магния Mg_i , определенными из оптических измерений. Также концентрация уровней $E1$ и $E2$ близка к концентрации Mg_i , обнаруженного по эффекту Холла после идентичной процедуры легирования кристаллов, близких к собственным. Таким образом, мы идентифицируем центры $E1$ и $E2$ как первый и второй донорные уровни Mg_i . Кроме того, обнаружен уровень $E3$, концентрация которого составляет $\sim 10\%$ от $[Mg_i]$. Энергетическое положение $E3$ позволяет связать его с центром Mg_{i*} , известным в литературе из оптических измерений.

Никаких других центров с уровнями в верхней половине запрещенной зоны не выявляется в объеме исследованных образцов. Это отличает нашу работу от ряда более ранних публикаций [12,13,15], в которых диффузия магния проводилась в похожих условиях. Повидимому, обнаруженные в тех работах уровни, которые явно отличаются от уровней Mg_i и Mg_{i*} , определяются либо агломератами атомов магния, либо их комплексами с другими примесями. Что касается работы [14], то обнаруженные там глубокие уровни могут определяться комплексами магния с собственными точечными дефектами, так как легирование радиоактивными изотопами проводилось методом ионной имплантации. Отсутствие в наших образцах электрически активных центров, отличающихся от Mg_i и Mg_{i*} , мы связываем с низкой концентрацией неконтролируемых примесей в исходных кристаллах, которые не были также загрязнены в процессе диффузии, а также с режимом постдиффузионного охлаждения образцов, который позволяет избежать формирования электрически активных агломератов магния.

Работа в ИПТМ выполнена в рамках госзадания 007-00220-18-00.

Список литературы

- [1] R.K. Franks, J.B. Robertson. Sol. St. Commun., **5**, 479 (1967).
- [2] L.T. Ho, A.K. Ramdas. Phys. Rev. B, **5**, 462 (1972).
- [3] A. Thilderkvist, M. Kleverman, H.G. Grimmeiss. Phys. Rev. B, **49**, 16338 (1994).
- [4] R.J.S. Abraham, A. DeAbreu, K.J. Morse, V.B. Shuman, L.M. Portsel, A.N. Lodygin, Y.A. Astrov, N.V. Abrosimov, S.G. Pavlov, H.-W. Hübers, S. Simmons, M.L.W. Thewalt. Phys. Rev. B, **98**, 045202 (2018).
- [5] J.E. Baxter, G. Ascarelli. Phys. Rev. B, **7**, 2630 (1973).
- [6] B. Pajot, G. Taravella, J.P. Bouchaud. Appl. Phys. Lett., **23**, 189 (1973).
- [7] A.L. Lin. J. Appl. Phys., **53**, 6989 (1982).
- [8] S.G. Pavlov, N. Deßmann, A. Pohl et al. Phys. Rev. B, **94**, 075208 (2016).
- [9] Y.A. Astrov, V.B. Shuman, L.M. Portsel, A.N. Lodygin, S.G. Pavlov, N.V. Abrosimov, V.N. Shastin, H.-W. Hübers. Phys. Status Solidi A, **214**, 1700192 (2017).
- [10] H. Sigmund. J. Electrochem. Soc., **129**, 2809 (1982).
- [11] В.Б. Шуман, А.Н. Лодыгин, Л.М. Порцель, А.А. Яковлева, Н.В. Абросимов, Ю.А. Астров. ФТП, **53**, 314 (2019).
- [12] И.В. Антонова, А.В. Васильев, В.И. Панов, С.А. Смагулова, Л.С. Смирнов, С.С. Шаймеев. ФТП, **21**, 684 (1987).
- [13] C. Häßler, G. Pensl. Mater. Sci. Forum, **143–147**, 123 (1994).
- [14] J. Bollmann, M. Thieme, J. Weber, ISOLDE collaboration. Physica B, **376–377**, 97 (2006).
- [15] E. Ohta, M. Sakata. Solid-State Electron., **22**, 677 (1979).
- [16] В.Б. Шуман, А.А. Лаврентьев, Ю.А. Астров, А.Н. Лодыгин, Л.М. Порцель. ФТП, **51**, 5 (2017).
- [17] L. Dobaczewski, A.R. Peaker, K. Bonde Nielsen. J. Appl. Phys., **96**, 4689 (2004).
- [18] A.L. Endrös, W. Krühler, J. Grabmaier. Physica B, **170**, 365 (1991).
- [19] O.V. Feklisova, N. Yarykin. Semicond. Sci. Technol., **12**, 742 (1997).
- [20] J. Frenkel. Phys. Rev., **54**, 647 (1938).
- [21] L.C. Kimerling, J.L. Benton. Appl. Phys. Lett., **39**, 410 (1981).
- [22] J.L. Hartke. J. Appl. Phys., **39**, 4671 (1968).
- [23] M. Ieda, G. Sawa, S. Kato. J. Appl. Phys., **42**, 3737 (1971).
- [24] В.Н. Абакумов, В.И. Перель, И.Н. Ясневич. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (СПб., Ин-т ядерной физики им. Константинова РАН, 1997).

Редактор А.Н. Смирнов

DLTS investigation of the Si : Mg energy spectrum

N. Yarykin¹, V.B. Shuman², L.M. Portsel²,
A.N. Lodygin², Y.A. Astrov²,
N.V. Abrosimov³, J. Weber⁴

¹ Institute of Microelectronics Technology and High Purity Materials, Russian Academy of Sciences, 142432 Chernogolovka, Russia

² Ioffe Institute, 194021 St. Petersburg, Russia

³ Leibniz Institute for Crystal Growth, D-12489 Berlin, Germany

⁴ Technische Universität Dresden, D-01062 Dresden, Germany

Abstract Electrically active centers were studied in n -type magnesium-doped silicon by using the deep-level transient spectroscopy (DLTS). Magnesium was introduced by diffusion at 1100°C from the surface metal film. The DLTS spectra are dominated by two levels with similar concentrations of $\sim 6 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, which is close to the interstitial magnesium (Mg_i) concentration expected from the earlier Hall-effect measurements for the given diffusion conditions. The rates of electron emission from both these levels as a function of the electric field strength follow qualitatively the Poole–Frenkel effect, which uncovers the donor nature of the centers; although absolute value of the effect differs from the theory. By extrapolation of the emission rates measured at different temperatures to zero field, the activation energies of the levels were found to be equal to 112 and 252 meV. These are coincident within the experimental accuracy with the first and second Mg_i ionization energies, respectively, as determined by the infrared absorption experiments. Thus, it is shown that interstitial magnesium is the only dominant center with levels in the upper half of the gap provided the high-quality initial material and proper diffusion parameters were used.