

ТЕРМИЧЕСКИЙ ОТЖИГ КЛАСТЕРОВ И ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В n-Si (Cz), ОБЛУЧЕННОМ БЫСТРЫМИ НЕЙТРОНАМИ РЕАКТОРА

А. П. Долголенко, М. Д. Варенцов, Г. П. Гайдар, П. Г. Литовченко

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев

Исследована термическая стабильность кластеров и точечных дефектов в n-Si, выращенном методом Чохральского (Cz), после облучения быстрыми нейтронами реактора флюенсом $\sim (2 \div 4) \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$. Эффективная концентрация носителей после ряда изохронных и изотермических отжигов облученного n-типа кремния с $n_0 = (0,4 \div 1,2) \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ до облучения была вычислена в рамках уточненной модели кластеров дефектов. Определены стадии изохронного отжига кластеров дефектов с энергиями активации (E_a) и частотными факторами (ν): $E_{a1} = 0,81 \text{ эВ}$, $\nu_1 = 5,4 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$; $E_{a2} = 0,4 \text{ эВ}$, $\nu_2 = 1 \text{ с}^{-1}$; $E_{a3} = 1,3 \text{ эВ}$, $\nu_3 = 6 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$. Изотермический отжиг при температуре 353 К кластеров дефектов и межузельных атомов I_{Si} ($E_c = 0,315 \text{ эВ}$) в проводящей матрице кремния был описан с $E_a = 0,74 \text{ эВ}$ и $\nu = (1 \div 3,5) \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$.

Введение

В изучении радиационных дефектов используются различные методы. При использовании одних методов достаточны очень малые дозы облучения, тогда как для других дозы облучения должны быть существенны, чтобы наблюдать изменение кинетических коэффициентов полупроводников. Эти методы можно объединить, если использовать термическую стойкость радиационных дефектов. Так, авторы [1] считают, что уровень $E_c = 0,09 \text{ эВ}$ связан с вакансией в кремнии, основываясь на том, что температура отжига дефекта всего $\sim 90 \text{ К}$. Энергия активации отжига А-центра, определенная по инфракрасному поглощению (ИК) и методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) в кремнии, стала основанием для уточнения ЭПР спектра [2].

В работах [3 - 7] исследованы изменения при отжиге электрических, оптических и магнитных свойств образцов кремния с введенными кластерами дефектов. Отжиг радиационных дефектов (А-, Е-центров, вакансий, межузельных атомов кремния и углерода) проводился в работах [8 - 13], но не было сделано оценки радиусов их захвата межузельным кислородом, узловым углеродом, атомами фосфора и VO-центрами.

Цель работы: исследовать изохронный и изотермический отжиг кластеров и точечных дефектов в проводящей матрице n-Si (Cz), облученном быстрыми нейтронами реактора; оценить радиусы захвата подвижных дефектов на стоки.

Эксперимент. Результаты измерений

В работе исследовались образцы n-Si, выращенные методом Чохральского, с удельным сопротивлением $\rho \sim (40 \div 120) \text{ Ом} \cdot \text{см}$. Облучение проводилось на горизонтальном канале реактора ВВР-М быстрыми нейтронами с расчетной энер-

гией выше $\sim 100 \text{ кэВ}$ при 287 К. Измерения проводимости и коэффициента Холла были выполнены компенсационным способом. Изохронный отжиг n-Si (Cz) ($n_0 \cong 1,2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$), облученного флюенсом $3,75 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$, проводился в температурном интервале (300 \div 600) К при выдержке 30 мин при каждой температуре. Изотермический отжиг n-Si (Cz) ($n_0 \cong 4,0 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$), облученного флюенсом $2 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$, проводился при 353, 378, 403 и 428 К длительностью до $\sim 10 \text{ ч}$.

Экспериментальные результаты представлены на рис. 1 - 7.

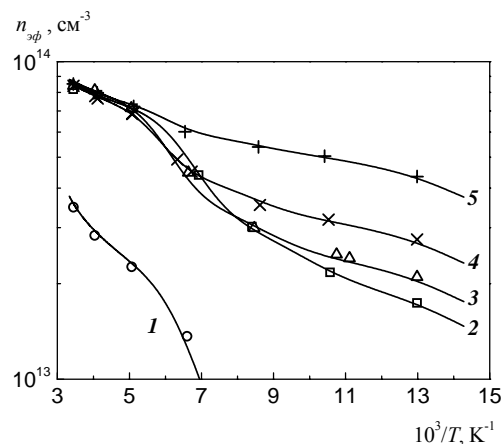


Рис. 1. Температурные зависимости эффективных концентраций электронов n-Si (Cz) ($n_0 \cong 1,2 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$), облученного быстрыми нейтронами реактора флюенсом $3,75 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ и отожженного 30 мин при температурах (К): 1 - 303; 2 - 475; 3 - 523; 4 - 578; 5 - 603.

Отжиг точечных дефектов

Описать отжиг проще всего при помощи уравнений, подобных тем, которые применяются в химической кинетике. Характерной особенностью процесса отжига первого порядка есть то,

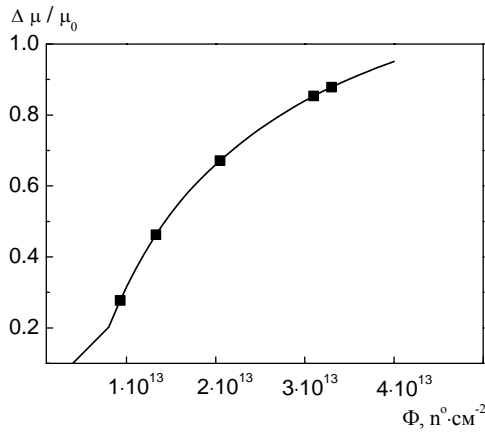


Рис. 2. Зависимость относительного изменения подвижности $\Delta\mu/\mu_0$ (Φ), измеренная при 77 К в образце n-Si (Cz) ($n_0 \cong 1,2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$), от флюенса облучения быстрыми нейтронами реактора (Φ).

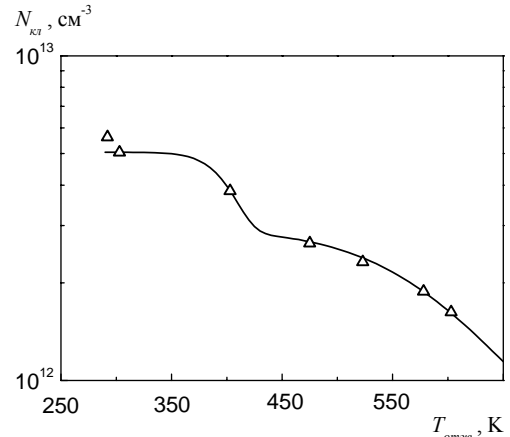


Рис. 3. Зависимость концентрации кластеров ($N_{кл}$) от температуры отжига ($T_{отж}$) после облучения образцов n-Si (Cz) ($n_0 \cong 1,2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$) флюенсом $3,75 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ быстрых нейтронов реактора (время отжига 30 мин). Δ – экспериментальные данные; — – результаты расчета.

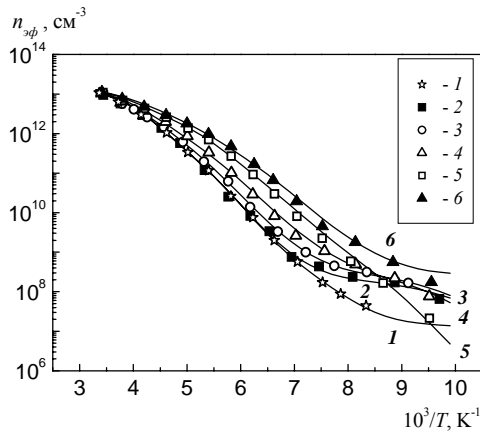


Рис. 4. Температурные зависимости эффективных концентраций электронов n-Si (Cz) ($n_0 \cong 3,9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$), облученного флюенсом $2 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ быстрых нейтронов реактора от времени (t) и температуры отжига ($T_{отж}$). 292 К: 1 – $8 \cdot 10^5 \text{ с}$, 2 – $5 \cdot 10^6 \text{ с}$; 353 К: 3 – $1,2 \cdot 10^3 \text{ с}$, 4 – $6 \cdot 10^3 \text{ с}$, 5 – $1,2 \cdot 10^4 \text{ с}$, 6 – $2,4 \cdot 10^4 \text{ с}$.

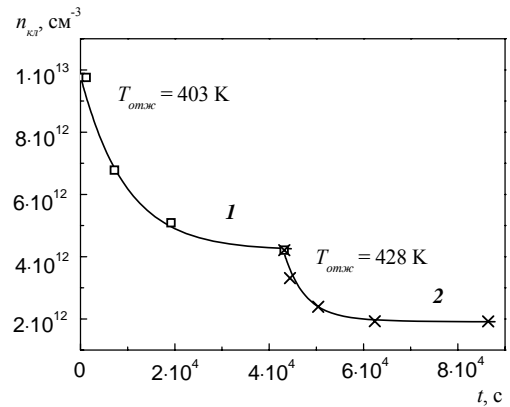


Рис. 5. Зависимость концентрации носителей, удаленных кластерами дефектов ($n_{кл}$), от времени отжига (t) при температурах 403 К (1) и 428 К (2) после облучения n-Si (Cz) ($n_0 \cong 4,2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) флюенсом $2 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ быстрых нейтронов реактора; \square , \times – экспериментальные данные; сплошные кривые – результаты расчета.

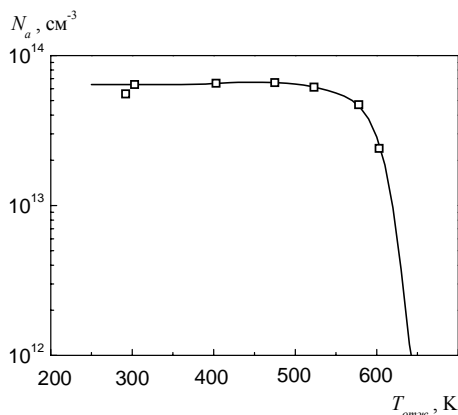


Рис. 6. Зависимость концентрации А-центров (N_A) в проводящей матрице n-Si (Cz) ($n_0 \cong 1,2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$) после облучения быстрыми нейтронами реактора флюенсом $3,75 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ и отжига 30 мин при различных температурах. \square – экспериментальные данные; — – результаты расчета.

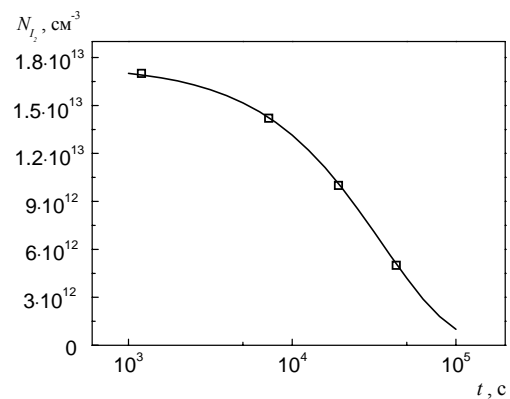


Рис. 7. Зависимость концентрации димежузельных атомов (N_{I_2}) в проводящей матрице n-Si (Cz) ($n_0 \cong 3,9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$), облученного флюенсом $2 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ быстрых нейтронов реактора, от времени изотермического отжига при 353 К.

что каждый дефект отжигается или увеличивает свою концентрацию независимо от других дефектов. Вакансионного типа дефекты отжигаются при аннигиляции с подвижными дефектами межузельного типа, энергия миграции которых зависит от их зарядового состояния [1]. Исчезновение P^i концентрации дефектов вследствие процесса отжига первого порядка можно определить через константу скорости K_i :

$$\frac{dP^i}{dt} = -K_i P^i. \quad (1)$$

Накопление P^j дефектов до максимальной концентрации P_m^j определяют через константу скорости K_j :

$$\frac{dP^j}{dt} + K_j (P^j - P_m^j) = 0. \quad (2)$$

Обычно константа скорости равна $K_{i,j} = A^{i,j} \exp(-E_a^{i,j} / kT)$, где $A^{i,j}$ – частотные факторы; $E_a^{i,j}$ – энергия активации процесса; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; i, j – количество каналов отжига и накопления дефектов соответственно.

Радиационные дефекты типа VO, V₂ стабильны при комнатной температуре, когда I, I₂ уже подвижны. При более высоких температурах VO, V₂ сами начинают мигрировать и захватываются на стоки (O_i, C_s).

Проинтегрировав уравнения (1) и (2) и просуммировав разные каналы отжига или накопления дефектов, получим

$$P(t) = \sum_{i=1}^k P_0^i \exp\left[-A^i t \exp(-E_a^i / kT)\right] + \sum_{j=1}^m P_m^j \left[1 - \exp\left(-A^j t \exp(-E_a^j / kT)\right)\right] - \sum_{l=1}^n P_{00}^l. \quad (3)$$

Последний член P_{00}^l связан с тем, что процесс отжига идет не до конца. Тут P_0^i – доля отжига концентрации дефектов в i -способе; P_m^j – доля накопления концентрации дефектов в j -способе; t – время отжига. Образование более стабильного дефекта возможно, например, за счет диссоциации другого дефекта. В работе рассматриваются возможные механизмы отжига дефектов: (i) линейный, предполагающий аннигиляцию дефектов на стоках; (ii) путем прямой рекомбинации вакансионных дефектов с межузельными и димежузельными атомами. Каждый процесс отжига

характеризуется своей энергией активации, которая может возрасти за счет переориентации дефекта.

Допустим, что отжиг дефекта ограничивается его диффузией на стоки. Такими стоками могут быть C_s-центры, межузельный кислород, кластеры дефектов. Тогда, согласно теории реакций, ограниченных диффузией [14], константу скорости можно записать в виде $K_C = 4\pi R_C D$, где R_C – радиус взаимодействия дефекта, например C_i-центра со стоками O_i или C_s; D – коэффициент диффузии дефекта. Пусть стоки в образце единичного объема занимают сферический объем радиуса R_a . Тогда $R_a = (3/4\pi N_{Cm})^{1/3}$. Тут N_{Cm} – концентрация стоков в единице объема образца (C_s, O_i).

Несмотря на статистически однородное введение пар Френкеля при электронном облучении кремния, распределение C_iC_s бистабильных дефектов и C_iO_i будет определяться распределением атомов узлового углерода C_s и межузельного кислорода O_i. При этом атомы C_i могут быть образованы как за счет реакции C_s + I → C_i, так и при отжиге C_iSn_s [10]. Среднее расстояние между атомами O_i или C_s равно $d = \sqrt{2} R_a$, а средний путь, который должны пробежать атомы углерода C_i на стоки (C_s, O_i) равен $L = d / \sqrt{2}$. Таким образом, можно предположить, что средний путь диффузии C_i на сток равен "атомному" радиусу стока R_a . Тогда в случае марковского процесса $L = \sqrt{D t}$:

$$D = \frac{1}{t} \left(\frac{3}{4\pi N_{Cm}} \right)^{2/3}, \quad (4)$$

где t – время отжига.

Последовательную теорию диффузионно-контролируемых реакций в твердых телах разработал Вайт [15], рассмотрев и случай, когда в квазихимическое взаимодействие вступают атомы, которые имеют разные коэффициенты диффузии в твердом теле. В нашем случае подвижным есть только один из компонентов взаимодействующих пар.

Если известна частота прыжков (ν) подвижного дефекта, то частотный множитель (D_0) можно оценить так $D_0 = (2a^2 \nu) / 3\pi$. Тут $a = 5,43 \text{ \AA}$ – постоянная решетки кремния. Если частоту прыжков (ν) подвижного дефекта невозможно определить, но концентрация стоков известна, то частотный множитель (D_0) можно определить как

$D = D_0 \exp(-E_a / kT)$, согласно (4). Известно, что при температуре 50 %-ного отжига дефекта при изохронном отжиге скорость отжига максимальна. Энергия активации отжига принималась равной энергии активации диффузии подвижного дефекта. При этом предполагается, что дефект проходит в среднем расстояние R_a при максимальной скорости своего исчезновения.

В рамках развитых представлений, согласно (3), были предложены реакции отжига и оценены радиусы захвата подвижных радиационных дефектов при соответствующей температуре на стоки, такие как междузельный кислород и узловой углерод, используя экспериментальные данные, полученные авторами [8 - 13]. Результаты вычислений представлены в табл. 1.

В работе [16] определено экспериментально, что атом фосфора имеет вероятность захвата ва-

кансии $(\gamma_{\text{вд}}/\gamma_{\text{во}}) = (1,8 \pm 0,9) \cdot 10^2$ большую, чем атом кислорода, но численные значения у разных авторов изменяются в пределах $(10 \div 200)$. Согласно полученным нами значениям (см. табл. 1) радиусов захвата вакансии атомами фосфора (180 Å) и кислорода (15 Å), в случае коррелированной рекомбинации этих пар, эти вероятности отличаются в $(180/15)^2 = 144$ раз. Отношение вероятностей захвата междузельного углерода (C_i) узельным углеродом и междузельным кислородом равно $23/17 = 1,33$, что подтверждает данные авторов [17], а не данные работы [18]. Поэтому предположение, что средний путь подвижного дефекта на сток равен атомному радиусу стока при максимальной скорости его отжига, получило экспериментальное подтверждение.

Таблица 1. Отжиг собственных радиационных дефектов в кремнии, лимитируемый диффузией

Реакция	Концентрация центров захвата, см ⁻³	D_0 , см ² /с	E_a , эВ	$R \cdot 10^8$, см	$T_{\text{отж}}$, К	Литература
$V_2 + O_i \rightarrow V_2O$	10^{18} ; O_i	$4,19 \cdot 10^{-4}$	1,3	16	500 ÷ 570	[8]
$V + O_i \rightarrow VO$	$8 \cdot 10^{17}$; O_i	$1,5 \cdot 10^{-3}$	0,8	15	300 ÷ 350	[9]
$VO + O_i \rightarrow VO_{2i}$	$8 \cdot 10^{17}$; O_i	$4,16 \cdot 10^2$	1,86	15	500 ÷ 550	[9]
$C_i + O_i \rightarrow CO$	$6 \cdot 10^{17}$; O_i	$1,17 \cdot 10^{-3}$	0,87	17	320 ÷ 380	[10]
$C_i + C_s \rightarrow C_iC_s$	$2,9 \cdot 10^{17}$; C_s	$2,53 \cdot 10^{-3}$	0,87	23	320 ÷ 380	[10]
$V^- + P^+ \rightarrow PV$	$5 \cdot 10^{14}$; P	$8,6 \cdot 10^{-2}$	0,8	180	300 ÷ 350	[11]
$PV^0 + O_i \rightarrow PVO$	$9 \cdot 10^{17}$; O_i	$3,82 \cdot 10^{-1}$	0,94	15	333	[12]
$PV^0 + O_i \rightarrow PVO$	$7 \cdot 10^{17}$; O_i	$1,06 \cdot 10^{-4}$	0,94	16	350 ÷ 450	[9]
$I + VO \rightarrow O_i$	$2,81 \cdot 10^{17}$; VO	$3,9 \cdot 10^{-5}$	0,91	22	400 ÷ 450	[13]
$I_2 + VO \rightarrow O_i + I$	$3,5 \cdot 10^{17}$; VO	$1,67 \cdot 10^{-4}$	0,74	20,3	290 ÷ 360	[13]
$O_{2i} + VO_i \rightarrow VO_{3i}$	$2,24 \cdot 10^{17}$; VO	1,5	1,7	23,7	530 ÷ 570	[13]
$I + \overset{\leftarrow}{VO} \rightarrow O_i$	$2,57 \cdot 10^{17}$; VO	$6,93 \cdot 10^{-3}$	1,3	22,5	470 ÷ 530	[13]

Получено, что радиусы захвата междузельным кислородом, узловым углеродом радиационных дефектов (вакансий, дивакансий, А-центров и др.) лежат в пределах (3 ÷ 4)-х постоянных решетки кремния. В табл. 1 приведены рассчитанные значения энергии активации отжига V_2 , VO , C_i , PV , I , I_2 , которые хорошо известны из многих работ других авторов.

Отжиг кластеров дефектов

Зависимость эффективной концентрации электронов в зоне проводимости кремния от температуры измерения представлена на рис. 1 после отжига при различных температурах. Расчет выполнен в рамках уточненной модели кластеров дефектов [19], а полученные параметры представлены в табл. 2. Очевидно, что после отжига можно определить только произведение

концентрации кластеров дефектов на их средний радиус скопления дефектов $N_{\text{кл}} R_1$, согласно [20].

Можно показать, что $N_{\text{кл}} R_1$ пропорциональна величине $\Delta\mu/\mu_0(\Phi)$ и поэтому $\Delta\mu/\mu_0(\Phi)$ будет определять $N_{\text{кл}} R_1$ от дозы облучения так же, как и $\Delta\mu/\mu_0(T_{\text{отж}})$ от температуры отжига. Тогда

$$\Sigma(T_{\text{отж}}) = \Sigma_0 \Phi \left(\frac{\Delta\mu}{\mu_0} \right) / \Phi_k, \text{ где } \Sigma_0 = 0,15 \text{ см}^{-1} - \text{ ве-}$$

роятность введения кластеров дефектов в кремний, облученный быстрыми нейтронами реактора; $\Phi_k = 3,75 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ – флюенс облучения образцов, отжигаемых при различных температурах. Аналогично $\Sigma(T_{\text{отж}}) = \Sigma_0 \Phi(T_{\text{кр}}) \cdot \Phi_k^{-1}$, так как $T_{\text{кр}}(d\mu/dT = 0)$ линейна дозе облучения Φ [21].

Таблица 2. Параметры расчета температурных зависимостей эффективной концентрации носителей в n-Si (Cz) ($n_0 = 1,2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$) после облучения флюенсом быстрых нейтронов реактора $\Phi = 3,75 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ и отжига 30 мин при температурах 475, 523, 578 и 603 К

$T_{отж}$, К	N_a , см^{-3}	E_a , эВ	$(\Sigma R_1) \cdot 10^7$	$T_{кр}$, К	$\Sigma(T_{кр})$	$\Sigma(\Delta\mu/\mu_0)$
292	$5,54 \cdot 10^{13}$	0,16	1,05	157	0,15	0,150
303*	$6,4 \cdot 10^{13}$	0,162	0,932	147	0,135	0,131
475	$6,6 \cdot 10^{13}$	0,158	0,511	74	0,071	0,074
523	$6,15 \cdot 10^{13}$	0,171	0,512	66,5	0,064	0,065
578	$4,7 \cdot 10^{13}$	0,178	0,608	54	0,052	0,050
603	$2,4 \cdot 10^{13}$	0,17	0,572	46,6	0,045	0,042

Примечания: 1. * – отжиг 6 лет. 2. N_a – концентрация А-центра; E_a – энергия уровня А-центра; $\Sigma(T_{кр})$ – сечение образования кластеров, определенное по $T_{кр}$; $\Sigma(\Delta\mu/\mu_0)$ – сечение, вычисленное по относительному изменению подвижности электронов; R_1 – радиус кластера дефектов.

Зависимость $\Delta\mu/\mu_0$ от дозы облучения, представленная на рис. 2, была измерена при 77 К. Изменение концентрации кластеров дефектов после 6 лет выдержки при комнатной температуре в зависимости от температуры отжига в течение 30 мин представлено на рис. 3. Концентрация кластеров определялась как по изменению $T_{кр}$, так и согласно $\Delta\mu/\mu_0(\Phi)$.

Отжиг кластеров дефектов, согласно формуле (1), был описан следующими параметрами: $E_{a1} = 0,81$ эВ, $v_1 = 5,4 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$; $E_{a2} = 0,4$ эВ, $v_2 = 1 \text{ с}^{-1}$; $E_{a3} = 1,3$ эВ, $v_3 = 6,0 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$. Первая стадия отжига кластеров дефектов связана с аннигиляцией вакансионного типа дефектов в кластере с межузельными атомами кремния [22]. Третья стадия отжига связана с миграцией дивакансий из кластеров на стоки. Известно, что дивакансии в кремнии уже подвижны при температуре (450 ÷ 520) К. Можно предположить, что

вторая стадия отжига кластеров дефектов связана с кластеризованием дивакансий согласно реакции $V_2 + V_2 \rightarrow V_4$. Поэтому энергия активации отжига уменьшается на величину энергии связи дивакансий в V_4 дефекте ($E_{св} = 0,9$ эВ).

Если (ΣR_1) разделить на величину Σ (см. табл. 2), то будет видно, что с увеличением температуры отжига экспериментально определенный размер оставшихся кластеров дефектов растет. Это подтверждают и авторы работы [4], которые наблюдали в кремнии разупорядоченные области размером $\sim 50 \text{ \AA}$.

Зависимость $n_{эф}(T)$ при отжиге при температуре 353 К образца n-Si (Cz) ($n_0 \cong 3,9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$) после облучения быстрыми нейтронами реактора флюенсом $2 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$ представлена на рис. 4 после различных времен отжига. Из рисунка видно, что концентрация носителей ($n_{эф}$) при 100 К была измерена до уровня $\sim 10^7 \text{ см}^{-3}$, что позволило надежно определять концентрацию дефектов $\sim 10^{10} \text{ см}^{-3}$.

Таблица 3. Изотермический отжиг n-Si (Cz) ($n_0 = 3,9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$), облученного быстрыми нейтронами реактора флюенсом $\Phi = 2 \cdot 10^{13} \text{ н}^0 \cdot \text{см}^{-2}$

$T_{отж}$, К	t , с	N_d , см^{-3}	$E_c - E_a$, эВ	$(\Sigma R_1) \cdot 10^7$
292	$8 \cdot 10^5$	$1,89 \cdot 10^{13}$	0,45	1,05
		$2,05 \cdot 10^{13}$	0,315	
292	$5 \cdot 10^6$	$1,89 \cdot 10^{13}$	0,45	1,05
		$2 \cdot 10^{13}$	0,315	
		$3 \cdot 10^{10}$	0,175	
353	$1,2 \cdot 10^3$	$1,89 \cdot 10^{13}$	0,45	1,05
		$1,7 \cdot 10^{13}$	0,315	
		$3 \cdot 10^{12}$	0,285	
		$5 \cdot 10^{10}$	0,175	
353	$6 \cdot 10^3$	$1,89 \cdot 10^{13}$	0,45	0,975
		$1,42 \cdot 10^{13}$	0,315	
		$5,8 \cdot 10^{12}$	0,28	
		$7 \cdot 10^{10}$	0,175	

$T_{отжж}, K$	t, c	N_0, cm^{-3}	$E_c - E_a, эВ$	$(\Sigma R_1) \cdot 10^7$
353	$1,2 \cdot 10^4$	$1,89 \cdot 10^{13}$	0,45	0,90
		$1 \cdot 10^{13}$	0,315	
		$1 \cdot 10^{13}$	0,26	
353	$2,4 \cdot 10^4$	$1,89 \cdot 10^{13}$	0,45	0,90
		$5 \cdot 10^{12}$	0,315	
		$1,5 \cdot 10^{13}$	0,26	

Примечания: 1. $T_{отжж}, t$ – температура и время отжига. 2. N_0 – концентрация дефектов в матрице n-Si (Cz).

Расчет выполнен в рамках уточненной модели кластеров дефектов [19], а полученные параметры представлены в табл. 3. Из табл. 2 и 3 можно видеть, что в проводящей матрице кремния при определенной температуре отжигаются А-центры и уровень ($E_c - 0,315$ эВ), который принадлежит димежузельному атому кремния $I_2^{-/0}$ [23]. Основными центрами отжига А-центров и димежузельных атомов кремния являются дефекты в кластерах.

На рис. 5 представлена вычисленная при 292 К зависимость концентрации электронов, удаленных кластерами дефектов, от времени отжига при температурах 403 и 428 К. Обычно концентрацию носителей, удаленных кластерами ($n_{кл}$), можно определить как $n_{кл} = n_0 (1 - n_{эф}/n)$. Здесь n_0, n – концентрация носителей до и после облучения в проводящей матрице; $n_{эф}$ – эффективная концентрация носителей в образце n-Si после облучения. Детально методика расчета $n_{эф}$ и n изложена в [24].

В результате проведенного расчета, согласно уравнению (3), были получены параметры изотермического отжига кластеров дефектов при температурах 403 К ($E = 0,81$ эВ, $\nu = 1,4 \cdot 10^6 c^{-1}$) и 428 К ($E_1 = 0,81$ эВ, $\nu = 1,4 \cdot 10^6 c^{-1}$).

Первая стадия отжига кластеров дефектов связана с аннигиляцией вакансионного типа дефектов кластеров с межузельными атомами кремния. Вторая стадия связана с миграцией дивакансий из кластера на стоки [25]. Уменьшение частотного фактора отжига кластеров при увеличении температуры изотермического отжига связана с аннигиляцией более удаленных межузельных атомов с вакансионными дефектами кластеров.

Зависимость концентрации А-центров в проводящей матрице n-Si (Cz) ($n_0 \cong 1,2 \cdot 10^{14} cm^{-3}$) от температуры отжига представлена на рис. 6. Расчет, согласно формуле (3), показал, что отжиг А-центров в проводящей матрице n-Si (Cz) происходит с энергией активации отжига $E_a = (1,6 \pm 0,1)$ эВ и частотным фактором $\nu = 1,6 \cdot 10^{10} c^{-1}$. При электронном облучении отжиг А-центра с энергией $E_a = 1,6$ эВ не наблюда-

ется, а отжиг с $E_a = 1,86$ эВ связан с миграцией А-центров на стоки (атомы O_i). Можно допустить, что уменьшение энергии активации отжига А-центра связано с деформационным полем кластеров дефектов, которые являются основными стоками А-центров.

Зависимость концентрации межузельных атомов (I_2) кремния (см. табл. 3) в проводящей матрице n-Si (Cz) ($n_0 \cong 3,9 \cdot 10^{13} cm^{-3}$) от времени отжига при температуре 353 К представлена на рис. 7. Расчет, согласно (3), показал, что отжиг I_2 ($E_c - 0,315$ эВ) происходит с энергией активации отжига $E_a = 0,74$ эВ и частотным фактором $\nu = 1,1 \cdot 10^6 c^{-1}$, что справедливо и при отжиге при 292 К. С такой же энергией отжигаются и кластеры дефектов, но с большим частотным фактором $\nu = 3,5 \cdot 10^6 c^{-1}$. Увеличение частотного фактора отжига кластеров дефектов связано с аннигиляцией вакансионных дефектов кластера с димежузельными атомами кремния, находящимися в областях пространственных зарядов кластеров.

При рекомбинации частиц, лимитированной диффузией, скорость реакции при наличии дальнедействующих сил между ними будет определяться некоторым эффективным радиусом, зависящим от потенциала взаимодействия [26]:

$$R_{эф}^{-1} = \int_{r_0}^{\infty} \exp(U_{\sigma} / kT) dr / r^2.$$

Тогда в отсутствие

сильно коррелированных пар Френкеля $R_{эф} = R_0 \exp(-U_{\sigma} / kT)$, где U_{σ} – барьер взаимодействия подвижного дефекта со стоком; $R_0 = R_{эф}$ при $U_{\sigma} = 0$.

Анализ изотермического отжига кластеров дефектов, рассмотренный в работе [22], в n-Si<Ge>, облученном быстрыми нейтронами реактора, показал, что эффективный радиус захвата межузельных атомов кремния (I и I_2) в кластеры равен $R_{эф} = 0,726 \exp\left(-\frac{0,41}{kT}\right)$ [см], где

$U_{\sigma} = 0,41$ эВ [27]. Также были оценены предэкспоненциальные множители коэффициента диффузии межузельных и димежузельных атомов

кремния в n-Si<Ge>: $D_0^{I_2} = 2,09 \cdot 10^{-9}$; $D_0^I = 4,17 \cdot 10^{-9}$ [см²/с].

Таким образом, энергия активации движения димежузлия в кремнии $E_a^{I_2} = 0,33$ эВ, а межузельного атома $E_a^I = 0,5$ эВ ($U_a = 0,41$ эВ). Можно указать, что I₂ находился в нейтральном зарядовом состоянии, а межузельные атомы кремния участвовали в отжиге вакансионных дефектов кластера, в основном, при отрицательном зарядовом состоянии.

Выводы

Показано, что средняя длина диффузии дефектов на стоки равна атомному радиусу стока и справедлива при 50 %-ном отжиге дефектов. В

результате вычислений получено, что радиус захвата межузельным кислородом подвижных радиационных дефектов (V, C_i, V₂, I₂, I, A-центров) находится в пределах (3 ÷ 4)-х постоянных решетки кремния. Описана температурная зависимость эффективной концентрации электронов в чохранальском n-типа кремнии при нескольких температурах изохронного и изотермического отжига. Сделано предположение, что деформационные поля кластеров дефектов уменьшают энергию отжига A-центров в проводящей матрице n-Si, облученного быстрыми нейтронами реактора. Показано, что отжиг кластеров дефектов связан с аннигиляцией вакансионных дефектов кластера с межузельными атомами, находящимися как в проводящей матрице, так и в областях пространственного заряда кластеров дефектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kimerling L. C., Blood P., Gibson W. M.* Defect states in proton-bombarded silicon at T<300 K // Proc. Conf. "Defects and Radiation Effects in Semiconductors". - 1978. - Ser. No. 46. Bristol-London, Inst. of Phys., 1979. - P. 273 - 280.
2. *Corbett J. W., Watkins G. D., Chrenko R. M., McDonald R. S.* Defects in Irradiated Silicon. II. Infrared Absorption of the Si-A Center // Phys. Rev. - 1961. - Vol. 121, No. 4. - P. 1015 - 1022.
3. *Dolgolenko A., Varentsov M., Gaidar G.* The energy-level position of bistable defect (C_iC_s)⁰ in B configuration in the forbidden band of n-Si // phys. stat. sol. (b). - 2004. - Vol. 241, No. 13 - P. 2914 - 2922.
4. *Pankratz J. M., Sprague J. A., Rudee M. L.* Investigation of Neutron-Irradiation Damage in Silicon by Transmission Electron Microscopy // J. Appl. Phys. - 1968. - Vol. 39, No. 1. - P. 101 - 106.
5. *Cheng L. J., Lori J.* Characteristics of Neutron Damage in Silicon // Phys. Rev. - 1968. - Vol. 171, No. 3. - P. 856 - 862.
6. *Mukashev B. N., Tamendarov M. F.* Optical Absorption and Electrical Studies of Proton-Bombarded Silicon // Радиационная физика полупроводников и родственных материалов: Тр. междунар. конф. (13 - 19 сентября 1979 г.). - Тбилиси: Изд-во Тбилисского ун-та, 1980. - С. 341 - 344.
7. *Stein H. J.* Atomic Displacement Effects in Neutron Transmutation Doping // The 2nd Intern. Conf. "Neutron Transmutation Doping in Semiconductors" / Ed. by J. Meese. - New York: Plenum Press, 1979. - P. 229 - 248.
8. *Lee Y. H., Corbett J. W.* EPR studies of defects in electron-irradiated silicon: A triplet state of vacancy-oxygen complexes // Phys. Rev. B. - 1976. - Vol. 13, No. 6. - P. 2653 - 2666.
9. *Zastavnoy A. V., Korol V. M.* Radiation Defects in n-Silicon Doped with Lithium and Sodium // phys. stat. sol. (a). - 1989. - Vol. 113. - P. 277 - 283.
10. *Хируненко Л. И., Кобзарь О. А., Помозов Ю. В. и др.* Влияние олова на реакции, протекающие с участием межузельного углерода в облученном кремнии // ФТП. - 2003. - Т. 37, В. 3. - С. 304 - 309.
11. *Медведева И. Ф., Мурин Л. И., Маркевич В. П.* Отжиг комплексов вакансия-фосфор в облученных кристаллах Si // Proc. of the 4th Intern. Conf. "Interaction of Radiation with Solids" (IRS-2001) (October 3 - 5, 2001). - Minsk, Belarus, 2001. - P. 183 - 185.
12. *Moll M., Fretwurst E., Kuhnke M., Lindstrom G.* Relation between microscopic defects and macroscopic changes in silicon detector properties after hadron irradiation // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. - 2002. - Vol. 186. - P. 100 - 110.
13. *Whan R. E.* Oxygen-Defect Complexes in Neutron-Irradiated Silicon // J. Appl. Phys. - 1966. - Vol. 37, No.9. - P. 3378 - 3382.
14. *Ясковец И. И.* Теория реакций между точечными дефектами в твердых телах: Автореф. дис. ... физ.-мат. наук. - К., 1972. - 21 с.
15. *Waite T. R.* Theoretical Treatment of the Kinetics of Diffusion-Limited Reactions // Phys. Rev. - 1957. - Vol. 107, No. 2. - P. 463 - 470.
16. *Винецкий В. Л., Ерищян Г. Н., Конозенко И. Д., Старчик М. И.* Скорость введения гамма-радиационных дефектов в кремний // ФТП. - 1968. - Т. 2, В. 9. - С. 1236 - 1242.
17. *Davies G., Lightowers E. C., Newman R. C., Oates A. S.* A model for radiation damage effects in carbon-doped crystalline silicon // Semicond. Sci. Technol. - 1987. - Vol. 2, No. 8. - P. 524 - 532.
18. *Маркевич В. П., Мурин Л. И.* Селективный захват межузельных атомов углерода в облученном Si // ФТП. - 1988. - Т. 22, В. 5. - С. 911 - 914.
19. *Dolgolenko A. P., Fishchuk I. I.* Defect Clusters and Simple Defect Build-Up Kinetics in Fast-Neutron Irradiated n-Si // phys. stat. sol. (a). - 1978. - Vol. 50. - P. 751 - 755.
20. *Dolgolenko A. P.* Variation of Carrier Removal Rate with Irradiation Dose in Fast-Pile Neutron Irradiated n-Si // phys. stat. sol. (a). - 2000. - Vol. 179. - P. 179 - 188.

21. Долголенко А. П., Галушка А. П. Влияние облучения дейтронами с энергией 13,5 МэВ на электрофизические свойства n-Si // ФТП. - 1971. - Т. 5, В. 12. - С. 2396 (деп. ВИНТИ, ДЭ-449).
22. Варенцов М. Д., Гайдар Г. П., Долголенко О. П., Литовченко П. Г. Відпал кластерів дефектів у зразках Si та Si<Ge>, вирощених методом Чохральського // Укр. фіз. журн. - 2007. - Т. 52, № 4. - С. 372 - 377; Ukr. J. Phys. - 2007. - Vol. 52, No. 4. - P. 372 - 377.
23. Dolgolenko A. P., Litovchenko P. G., Varentsov M. D. et al. Particularities of the formation of radiation defects in silicon with low and high concentrations of oxygen // phys. stat. sol. (b). - 2006. - Vol. 243, No. 8. - P. 1842 - 1852.
24. Dolgolenko A. P., Litovchenko P. G., Litovchenko A. P. et al. Influence of growing and doping methods on radiation hardness of n-Si irradiated by fast-pile neutrons // Semiconductor Physics, Quantum & Optoelectronics. - 2004. - Vol. 7, No. 1. - P. 8 - 15.
25. Гайдар Г. П., Долголенко О. П., Литовченко П. Г. Термічний відпал радіаційних дефектів в n-Si, опромінену швидкими нейтронами реактора // Укр. фіз. журн. - 2008. - Т. 53, № 7. - С. 691 - 696; Ukr. J. Phys. - 2008. - Vol. 53, No. 7. - P. 688 - 693.
26. Пекар С. И. Исследования по электронной теории кристаллов. - М. - Л.: Гостехиздат, 1951. - 256 с.
27. Винецкий В. Л., Холодарь Г. А. Радиационная физика полупроводников: Монография. - К.: Наук. думка, 1979. - 336 с.

ТЕРМІЧНИЙ ВІДПАЛ КЛАСТЕРІВ І ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ В n-Si (Cz), ОПРОМІНЕНОМУ ШВИДКИМИ НЕЙТРОНАМИ РЕАКТОРА

О. П. Долголенко, М. Д. Варенцов, Г. П. Гайдар, П. Г. Литовченко

Досліджено термічну стабільність кластерів і точкових дефектів в n-Si, вирощеному методом Чохральського (Cz), після опромінення швидкими нейтронами реактора флюенсом $\sim (2 \div 4) \cdot 10^{13} \text{ n}^0 \cdot \text{cm}^{-2}$. Ефективну концентрацію носіїв після ряду ізохронних та ізотермічних відпалів опроміненого n-типу кремнію з $n_0 = (0,4 \div 1,2) \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ до опромінення описано в рамках уточненої моделі кластерів дефектів. Визначено стадії ізохронного відпалу кластерів дефектів з енергіями активації (E_a) та частотними факторами (ν): $E_{a1} = 0,81 \text{ eV}$, $\nu_1 = 5,4 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$; $E_{a2} = 0,4 \text{ eV}$, $\nu_2 = 1 \text{ c}^{-1}$; $E_{a3} = 1,3 \text{ eV}$, $\nu_3 = 6 \cdot 10^4 \text{ c}^{-1}$. Ізотермічний відпал при температурі 353 К кластерів дефектів і міжвузлових атомів I_{Si} ($E_c = 0,315 \text{ eV}$) у провідній матриці кремнію описано з $E_a = 0,74 \text{ eV}$ та $\nu = (1 \div 3,5) \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$.

THERMAL ANNEALING OF CLUSTERS AND POINT DEFECTS IN n-Si (Cz) IRRADIATED BY FAST-PILE NEUTRONS

A. P. Dolgolenko, M. D. Varentsov, G. P. Gaidar, P. G. Litovchenko

Thermal stability of clusters and point defects in n-Si grown by Czochralski technique (Cz) was studied after irradiation by the fluence $\sim (2 \div 4) \cdot 10^{13} \text{ n}^0 \cdot \text{cm}^{-2}$ of fast-pile neutrons. The effective concentration of carriers after series of isochronal and isothermal annealings of irradiated n-type silicon with $n_0 = (0.4 \div 1.2) \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ before irradiation was described in the framework of the defect cluster corrected model. Stages of isochronal annealing process of defect clusters were determined with activation energies (E_a) and frequency factors (ν): $E_{a1} = 0.81 \text{ eV}$, $\nu_1 = 5.4 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$; $E_{a2} = 0.4 \text{ eV}$, $\nu_2 = 1 \text{ s}^{-1}$; $E_{a3} = 1.3 \text{ eV}$, $\nu_3 = 6 \cdot 10^4 \text{ s}^{-1}$. Isothermal annealing at 353 K of defect clusters and interstitial atoms I_{Si} ($E_c = 0.315 \text{ eV}$) in the conducting matrix of silicon was described with $E_a = 0.74 \text{ eV}$ and $\nu = (1 \div 3.5) \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$.

Поступила в редакцію 06.02.08,
после доработки – 21.07.08.