

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

АННИГИЛЯЦИЯ ПАР ФРЕНКЕЛЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В. В. Емцев, Т. В. Машовец, В. В. Михнович

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021, Санкт-Петербург, Россия
(Получено 26.10.1992. Принято к печати 3.11.1992)

Изучению процессов аннигиляции генетически связанных компонентов пар Френкеля — вакансий V и межузельных атомов I — в последние годы уделяется большое внимание. Интерес к этому вопросу обусловлен необходимостью прогнозирования изменений свойств полупроводников при различных условиях электронного и гамма-облучения. К сожалению, необходимый для прогнозирования результатов облучения уровень понимания процессов аннигиляции пока не достигнут, хотя в некоторых случаях уже сейчас удается качественно предсказывать изменения вероятности аннигиляции или разделения генерированных облучением V и I при изменении условий облучения.

Далее рассматривается вопрос о зависимости вероятности аннигиляции (W) от энергии бомбардирующих электронов или гамма-квантов (E) и показано, что вопреки существующей точке зрения о монотонном уменьшении W с ростом E зависимость вероятности аннигиляции от энергии может иметь немонотонный характер, что приводит к некоторым особенностям в поведении зависимости W от условий облучения: интенсивности, температуры, а также от типа проводимости и уровня легирования облучаемого материала.

В качестве обоснования существующей точки зрения о монотонном уменьшении W с ростом E обычно приводится следующий довод: с увеличением энергии возрастает среднее расстояние R между V и I , что приводит к уменьшению энергии притяжения между V и I , в результате W уменьшается. Расстояние между V и I непосредственно после рождения пары Френкеля:

$$R(E) = \int f(r, E) r dr, \quad (1)$$

где $f(r, E)$ — функция зарождения (fdV — вероятность того, что после выхода атома из узла межузельный атом будет находиться на расстоянии r от вакансии в элементе объема dV). При этом учитывается кулоновское взаимодействие между компонентами. Однако энергия взаимодействия является функцией не просто расстояния между компонентами (как в случае кулоновского взаимодействия), а функцией радиуса-вектора, соединяющего V и I . Это обстоятельство, как будет показано далее, и приводит к немонотонной зависимости W от E .

В работе [1] для полупроводников кубической симметрии в приближении упругого анизотропного континуума и изотропных центров дилатации (V и I рассматриваются как такие центры) было получено (в кристаллографической системе координат) выражение для энергии взаимодействия между V и I с учетом кулоновского, деформационного и поляризационного взаимодействия. Де-

формационное взаимодействие обусловлено тем, что генерация вакансий и межузельных атомов приводит к появлению деформаций. Деформации вследствие пьезоэффекта (случай полярного кристалла) и флексоэлектрического эффекта [2, 3] обуславливают поляризацию решетки. В этом случае выражение для полной энергии взаимодействия компонентов пары Френкеля $V(r)$ имеет вид

$$U(r) = U_k(r) + U_d(r) + U_p(r), \quad (2)$$

где

$$U_d(r) = \frac{A(\theta, \varphi)}{r^3}; \quad U_p(r) = \frac{B(\theta, \varphi)}{r^3} + \frac{C(\theta, \varphi)}{r^2};$$

U_k , U_d , U_p — кулоновская, деформационная, поляризационная энергии взаимодействия соответственно. Первое слагаемое в выражении для U_p обусловлено флексоэлектрическим эффектом, второе — пьезоэффектом, A , B , C — известные [1] функции полярного (θ) и азимутального (φ) углов вектора $n = r/r$ в кристаллографической системе координат, при этом один из компонентов пары помещен в начало координат. При этом важно, что A , B , C и полная энергия взаимодействия — знакопеременные функции θ и φ [1]. В дальнейших рассуждениях мы воспользуемся этим обстоятельством, причем конкретный вид $A(n)$, $B(n)$, $C(n)$ не будет играть существенной роли.

После выхода атома из узла компоненты пары испытывают либо притяжение, либо отталкивание, так как $U(r, \theta, \varphi)$ — знакопеременная функция θ и φ . Поместим для определенности в начало координат вакансию. Разобьем пространство, окружающее вакансию, на две области: область S_1 , попав в которую межузельный атом испытывает притяжение к вакансии, и область S_2 , где существует отталкивание. В области S_1 выделим ту ее часть \bar{S}_1 , где $V(r) \leq -kT$. Будем полагать, что если межузельный атом попал в точку r , принадлежащую \bar{S}_1 , то вероятность аннигиляции близка к единице. Межузельный атом может попасть в область \bar{S}_1 двумя путями:

а) непосредственно после выхода атома из узла I оказывается в области \bar{S}_1 ;

б) после выхода атома из узла I оказывается в области S_2 , причем в таких точках r , принадлежащих этой области, из которых он путем одного скачка может оказаться в области \bar{S}_1 (можно рассмотреть случай нескольких скачков, однако вероятность такого процесса мала). Обозначим эту область через \bar{S}_2 .

Иными словами, область \bar{S}_2 состоит из множества точек с координатами (r, θ, φ) , удовлетворяющими условиям:

$$1) \delta R(r_1, \theta_1, \varphi_1, r, \theta, \varphi) \approx d;$$

$$2) 0 \leq \delta U(r, \theta, \varphi) \leq -kT.$$

Здесь δR — расстояние между двумя произвольными точками, одна из которых принадлежит области \bar{S}_1 (точка с координатами r_1, θ_1, φ_1), а другая — \bar{S}_2 (точка с координатами r, θ, φ), d — величина скачка межузельного атома; $\delta U(r, \theta, \varphi)$ — величина барьера, который преодолевает межузельный атом, находившийся первоначально в точке с координатами (r, θ, φ) , при переходе в область \bar{S}_1 . Первое условие вытекает из требования, чтобы переход осуществлялся путем одного скачка, второе условие — из требования, чтобы вероятность такого перехода была заметной (вероятность экспоненциально уменьшается с увеличением δU).

Выражение для вероятности аннигиляции имеет вид

$$W = \int \gamma_0(r_1) f(r_1, E) dr_1 + \frac{1}{V_{\bar{S}_1}} \int \int \gamma_0(r_1) \times$$

где $\gamma_0(r_1)$ — вероятность аннигиляции вакансии и межузельного атома, находящегося в точке r_1 , принадлежащей области \bar{S}_1 ; $\gamma_1(r, r_1)$ — вероятность перехода межузельного атома (путем одного скачка) из точки r , принадлежащей области \bar{S}_2 , в точку r_1 . Первое слагаемое соответствует вероятности аннигиляции в случае, когда межузельный атом попадает в область \bar{S}_1 непосредственно после выхода его из узла, второе слагаемое соответствует вероятности аннигиляции в случае, когда атом попадает в область \bar{S}_1 из области \bar{S}_2 . Разумно считать, что в области \bar{S}_1 , где $U(r_1) \leq -kT$, $\gamma_0 = \text{const}$.

В результате можно получить

$$W = \gamma_0 \left[N_1 + \frac{1}{V_{\bar{S}_1}} \int \int \gamma_1(r, r_1) f(r, E) dr_1 dr \right], \quad (4)$$

где N_1 — доля межузельных атомов (нормированная на единицу), находящихся в области \bar{S}_1 .

Если в рассмотрении учитывать только первый способ попадания I в область \bar{S}_1 (пункт а), то в выражении (4) следует учитывать только первое слагаемое, тогда $W \propto N_1$. В этом случае при увеличении энергии бомбардирующих электронов W монотонно уменьшается, так как монотонно уменьшается N_1 из-за увеличения среднего расстояния между V и I . Таким образом, этот случай соответствует общепринятой точке зрения на характер зависимости W от E .

Если в рассмотрении учесть оба способа попадания I в область \bar{S}_1 , то в выражении (4) следует учесть оба слагаемых. Проанализируем зависимость W от E в этом случае. Так как $\gamma_1(r, r_1) \approx \exp\left[-\frac{\delta U(r)}{kT}\right]$, т. е. γ_1 является функцией только r , то

$$W = \gamma_0 \left[N_1 + \int \gamma_1(r) f(r, E) dr \right]. \quad (5)$$

Далее, так как $\gamma_1(r)$ не зависит от условий облучения и не очень сильно зависит от r ($0 \leq \delta U(r) \leq -kT$), то можно положить, что зависимость второго слагаемого в правой части выражения (5) от условий облучения качественно совпадает с зависимостью доли N_2 межузельных атомов, находящихся в области \bar{S}_2 : $N_2 = \int f(r, E) dr$. Поэтому, преобразовав выражение (5) к виду

$$W = \gamma_0 [N_1 + \langle \gamma_1(r) \rangle N_2], \quad (6)$$

где

$$\langle \gamma_1(r) \rangle = \frac{\int \gamma_1(r) f(r, E) dr}{\int f(r, E) dr}$$

будем полагать (при качественном анализе), что $\langle \gamma_1(r) \rangle$ от условий облучения не зависит либо зависит слабо.

Проанализируем зависимость N_2 от E . Так как с увеличением энергии электронов или гамма-квантов среднее расстояние R между компонентами растет, то энергии взаимодействия между ними уменьшается. В результате объем области \bar{S}_2 возрастает, так как увеличивается область, где выполняется условие $0 \leq \delta U(r) \leq -kT$. Здесь необходимо отметить, что область \bar{S}_2 , как указывалось выше, определяется из двух условий: $0 \leq \delta U(r) \leq -kT$ и $\delta R \approx d$. Однако, как следует из результатов работы [1], при увеличении расстояния между компонентами пары область \bar{S}_2 лимитируется сначала первым условием, а затем вторым.

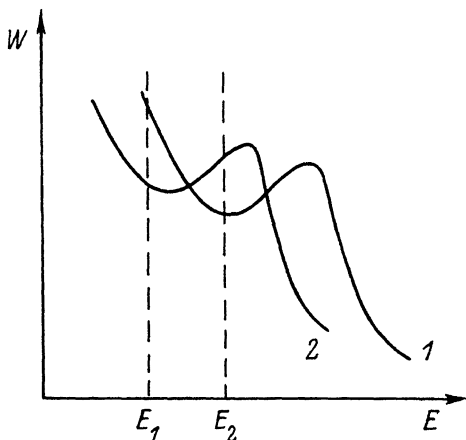
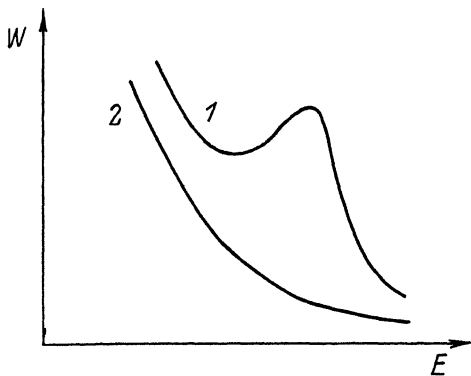


Рис. 1. Зависимость вероятности аннигиляции компонентов пары Френкеля, W , от энергии бомбардирующих электронов или гамма-квантов, E : 1 — учитываются межузельные атомы, переходящие в область \bar{S}_1 из области \bar{S}_2 ; 2 — учитываются только те межузельные атомы, которые непосредственно образуются в области \bar{S}_1 .

Рис. 2. Зависимость вероятности аннигиляции W от энергии E при двух значениях интенсивности облучения: 1 — J_1 , 2 — J_2 , $J_1 < J_2$.

При дальнейшем увеличении E расстояние между V и I достигает таких значений R , при которых $\delta R > d$. В результате объем области \bar{S}_2 уменьшается. Таким образом, с увеличением E доля N_2 межузельных атомов, содержащихся в области \bar{S}_2 , сначала увеличивается, а затем уменьшается. Учитывая, что доля N_1 межузельных атомов, содержащихся в области \bar{S}_1 , монотонно уменьшается при увеличении E , получим, что вероятность аннигиляции (6) может иметь немонотонную зависимость от E . На рис. 1 изображены такая качественная зависимость (кривая 1) и зависимость, которую обычно имеют в виду при анализе процесса аннигиляции компонентов пар Френкеля, когда учитываются только те межузельные атомы, которые попадают в область \bar{S}_1 непосредственно после выхода атома из узла (кривая 2).

Покажем, что немонотонная зависимость W от E приводит к некоторым особенностям в зависимости вероятности аннигиляции от условий облучения. При вариации условий облучения могут меняться зарядовые состояния компонентов (см., например, [5]), что влечет за собой изменение энергии взаимодействия между V и I и, следовательно, изменение объемов областей \bar{S}_1 и \bar{S}_2 , а также доли межузельных атомов N_1 и N_2 , находящихся в областях \bar{S}_1 и \bar{S}_2 . Проанализируем, например, зависимость W от интенсивности облучения J .

Будем полагать, что вакансия может находиться в зарядовых состояниях V^- и V^0 , а межузельный атом — в состояниях I^0 и I^+ , такая ситуация может реализоваться, например, в германии [5]. При увеличении интенсивности облучения (при не слишком больших интенсивностях, см. [6]) энергия взаимодействия между V и I уменьшается. Следовательно, уменьшаются и объем области \bar{S}_1 , и доля N_1 межузельных атомов, содержащихся в этой области. При этом объем области, где выполняются условия $0 \leq \delta U(r) \leq -kT$ и $\delta R = d$ (области \bar{S}_2), увеличивается. Таким образом, если рассматривать зависимость W от E при различных интенсивностях облучения, то при увеличении J положения экстремумов на кривой 1 рис. 1 будут смещаться в область меньших E , а сами кривые $W(E)$ для различных J будут пересекаться. На рис. 2 изображены качественные зависимости $W(E)$ при двух значениях J ($J_1 < J_2$).

Из качественных зависимостей, представленных на рис. 2, следует, что при облучении полупроводников электронами или гамма-квантами различных энергий зависимость вероятности аннигиляции генетически связанных V и I от интенсивности облучения может быть различной, например, при $E = E_1$ вероятность аннигиляции уменьшается, а при $E = E_2$ — увеличивается при возрастании J . Отметим, что в разных полупроводниках энергетические спектры V и I различны, однако выбор конкретного спектра зарядовых состояний хотя и повлияет на характер зависимости W от J , но не повлияет на сам вывод о возможном качественном различии в характере зависимости вероятности аннигиляции от интенсивности облучения.

Поскольку температура облучения и уровень легирования полупроводника влияют на зарядовые состояния компонентов пары Френкеля, характер зависимости W от температуры облучения и уровня легирования также может быть различным при разных энергиях облучения.

Далее, положение экстремумов на зависимости W от (E) (рис. 1, кривая 1) будет различным для разных полупроводников, и, следовательно, облучение различных материалов электронами или гамма-лучами одной и той же энергии может приводить к качественному изменению зависимости W от интенсивности и температуры облучения, а также от уровня легирования.

Напомним, что соотношение вероятностей аннигиляции и разделения компонентов пары Френкеля определяет эффективность образования устойчивых при комнатной температуре комплексов, изменяющих параметры полупроводника при его облучении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] В. А. Артемьев, В. В. Михнович. О диффузионно-контролируемых скоростях реакций радиационного дефектообразования в полупроводниках, 4630. М. (1987).
- [2] Ш. М. Коган. ФТТ, 5, 2829 (1963).
- [3] В. Л. Инденбом, Е. Б. Логинов, М. А. Осипов. Кристаллография, 26, 1157 (1981).
- [4] В. В. Михнович. Вторичные процессы в облученных легкими частицами полупроводниках кубической симметрии. Докт. дис. ЛГТУ, Л. (1991).
- [5] В. В. Емцев, Т. В. Машовец, В. В. Михнович. ФТП, 26, 20 (1992).
- [6] В. В. Михнович, В. В. Емцев, Т. В. Машовец, Н. А. Витовский. ФТТ, 31, 306 (1989).

Редактор В. В. Чалдышев

ФТП, том 27, вып. 4, 1993

УВЕЛИЧЕНИЕ ФОТОПРОВОДИМОСТИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

К. И. Викулина, В. И. Ирха, И. П. Шнайдер

Учебно-производственный центр при Одесском государственном университете
им. И. И. Мечникова, 270063, Одесса, Украина
(Получено 9.10.1992. Принято к печати 18.11.1992)

Фотопроводимость любого полупроводника пропорциональна эффективному времени жизни генерированных светом носителей τ_e . Увеличивая τ_e , можно значительно улучшить все основные параметры фоторезисторов [1]. Как правило, τ_e в основном определяется скоростью рекомбинации неравновесных носителей на поверхности s , которая больше скорости объемной рекомбинации. Отклоняя движущиеся носители от поверхности, можно увеличить τ_e и фотопроводимость. С этой целью в наших экспериментах полупроводник помещался в магнитное