

УДК 621.315.592

ПАРЫ ФРЕНКЕЛЯ В ГЕРМАНИИ И КРЕМНИИ

ОБЗОР

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

Дан обзор современных представлений о свойствах первичных собственных дефектов структуры — пар Френкеля (ПФ) — в кремнии и германии. Рассматривается процесс образования ПФ в условиях облучения электронами или γ -лучами с энергией ~ 1 МэВ в интервале температур 4.2—300 К.

Проведен оценочный расчет энергии взаимодействия компонентов ПФ — вакансий (V) и межузельных атомов (I) в приближении анизотропного упругого континуума с учетом электростатического и упругого взаимодействия. Показано, что вклад флексоэлектрического эффекта может быть значительным и должен учитываться при оценке энергии электростатического взаимодействия между V и I и в тех случаях, когда один или оба компонента ПФ электрически нейтральны.

Обсуждается вопрос о подвижности V и I , в том числе в условиях облучения, а также об их энергетическом спектре. Энергетические состояния вакансии (a , возможно, и межузельного атома), в кремнии образуют систему с отрицательной корреляционной энергией.

На основании сделанных оценок следует ожидать, что энергетический спектр V и I , образующих метастабильную «близкую» ПФ, как в кремнии, так и в германии, существенно возмущен по сравнению со спектром изолированных V и I .

Обсуждается вопрос о зависимости вероятности аннигиляции гомогенных (происходящих из одного узла решетки) V и I от целого ряда параметров — температуры и интенсивности облучения, примесного состава облучаемого материала, концентрации равновесных и неравновесных носителей в нем. Этот анализ позволяет качественно интерпретировать сложную немонотонную зависимость эффективности образования первичных и вторичных (включающих в себя примесные атомы) дефектов от температуры и интенсивности облучения, от типа проводимости германия. Построена номограмма, описывающая зависимость эффективности дефектообразования в n -германии при 300 К от интенсивности облучения и концентрации доноров V группы.

Показано, что метастабильные ПФ в кремнии не наблюдаются, германий же предоставляет уникальную возможность наблюдать такие ПФ в элементарном полупроводнике с ковалентным типом связи.

Пара Френкеля (ПФ) и ее компоненты — собственный межузельный атом (I) и вакансия (V) — элементарные первичные дефекты кристаллической структуры. Исследование ПФ в полупроводниках первоначально представлялось сравнительно простой задачей. Считалось, что с помощью термообработки с последующей закалкой до комнатной температуры можно получить достаточно большую неравновесную (соответствующую температуре термообработки) концентрацию I и V , после чего их микроскопические параметры и энергетический спектр могут быть исследованы традиционными методами. Возможность такого решения как будто бы подтверждалась ранними опытами по изучению самодиффузии (с использованием меченых атомов), из которых следовало, что компоненты ПФ в германии и кремнии при комнатной температуре практически неподвижны. Оказалось, однако, что определяемые в таких опытах значения энергий миграции относятся отнюдь не к простейшим дефектам, а к разного рода комплексам, образующимся в процессе термообработки, сами же компоненты ПФ подвижны не только при комнатной, но и при более низких температурах, и их изучение представляет значительные трудности.

Революционную роль в изучении дефектов структуры (особенно простейших) сыграли опыты по облучению полупроводников ядерными частицами или γ -квантами. Решающим фактором оказалась возможность генерации неравновесных ПФ при температуре, достаточно низкой для «замораживания» дефектов.

Для того чтобы ПФ были дефектами доминирующего типа (по сравнению с дивакансиями, многовакансионными комплексами, кластерами и т. п.), необходимо, чтобы энергия облучения была не слишком большой, при этом она должна быть достаточной для смещения одного регулярного атома из узла кристаллической решетки, т. е. должна превышать пороговую энергию смещения E_d . Атому решетки с массой M при упругом взаимодействии с релятивистским электроном с энергией E_e и массой m может быть передана энергия E , величина которой лежит в пределах от нуля до максимальной — $E_{\max} = \frac{2(E_e + 2mc^2)}{Mc^2} E_e$ (c — скорость света) [1]. Смещение происходит в том случае, когда E превосходит E_d , при этом процесс образования простейших дефектов, пар Френкеля,

Т а б л и ц а 1

Энергии активации миграции вакансий и собственных межузельных атомов в кремнии и германии

Полупроводник	Тип дефекта	Энергия активации миграции, эВ	Литературный источник
Si	V^-	0.18	[3]
	V^-	0.25	[4, 5]
	V^0	0.45	[3]
	V^+	?	
	V^-	0.32	[3]
	I^0	0.13	[1, 5]
Ge	I^+, I^{++}	?	
	V^{--}	?	
	V^-	0.42	[1, 5]
	V^0	0.52	[4, 5]
	I^0	0.15	[4-7]
	$I^{+?}$	0.07	[7]

доминирует при $E_d < E < 2E_d$. Экспериментально было показано, что в германии и кремнии образование точечных дефектов происходит (и не маскируется образованием дефектов более сложных типов) при облучении электронами и γ -лучами с энергией 0.5—2 МэВ.¹

Вероятность непосредственного взаимодействия γ -квантов с ядрами облучаемого вещества при таких энергиях пренебрежимо мала, их действие сводится в основном к появлению комптон- и фотоэлектронов. В силу большой проникающей способности γ -лучей эти электроны образуются равномерно по объему образца, соответственно однородно распределенными по объему оказываются и ПФ, образующие при γ -облучении. При электронном облучении при энергиях, близких к пороговой, необходимо учитывать уменьшение концентрации дефектов с увеличением расстояния от облучаемой поверхности.

Одним из наиболее важных результатов исследования низкотемпературного облучения кремния электронами с энергией 1.5 МэВ явилось обнаружение неожиданно высоких подвижностей I и V , особенно в условиях облучения [2], именно эти данные вступили в противоречие с упомянутыми выше результатами

¹ При облучении тепловыми нейтронами доминируют ядерные реакции, при облучении быстрыми нейтронами, ионами или электронами с энергией > 10 МэВ — образование кластеров или разупорядоченных областей.

исследования высокотемпературной самодиффузии. Используемые в настоящее время значения энергий миграции I и V для германия и кремния приведены в табл. 1.

Считается, кроме того, что в условиях низкотемпературного облучения реализуется неизвестный ранее ионизационный механизм миграции дефектов, получивший название механизма Бургуэна—Корбетта [8], который может обеспечить миграцию межузельного атома в условиях облучения практически при сколь угодно низкой температуре. Согласно этим представлениям, для межузельного атома в различных зарядовых состояниях (например, I^0 и I^+) энергетически выгодными являются различные межузельные положения (например, тетраэдрическое T и гексагональное H). В условиях низкотемпературного облучения перезарядка $I^0 \rightarrow I^+$ сопровождается атермическим пространственным переходом $T \rightarrow H$, при последовательных перезарядках реализуется миграция. Если существует межузельная конфигурация типа гантели (два равноценных атома в одном узле), то для собственного межузельного атома возможно эстафетное перемещение [9]. Для кремния потенциальный рельеф, позволяющий оценить вероятности переходов между различными межузельными конфигурациями, моделирован в [10, 11]. За счет перезарядок в условиях облучения может ускоряться и движение вакансий [3] и примесных атомов [12].

Вследствие высокой подвижности собственного межузельного атома судьба генерированной ПФ может быть различной.

1. Даже при очень низкой температуре в условиях облучения возможно ионизационно-стимулированное движение I и его возвращение в покинутый узел решетки, т. е. аннигиляция со своей вакансией («гомогенная» аннигиляция).

2. После прекращения облучения при достаточно низкой температуре возможно существование метастабильной ПФ. Далее показано, что такая возможность реализуется только в германии.

3. Если один или оба компонента ПФ подвижны, они могут разделиться. После разделения возможна аннигиляция I и V , образовавшихся в разных узлах («гетерогенная» аннигиляция), а также формирование более сложных вторичных собственных дефектов (многовакансионных комплексов, скоплений межузельных атомов). Заметим, что наряду с прямой аннигиляцией I и V может происходить аннигиляция через центры — путем последовательного захвата примесным атомом вакансии, а затем межузельного атома (или наоборот). При не слишком больших интенсивностях облучения, когда квазистационарные концентрации I и V малы по сравнению с концентрациями примесей, их взаимодействие с примесными атомами оказывается наиболее эффективным процессом. При этом образуются вторичные дефекты, например, электрически активные комплексы, включающие в себя примесные атомы (которые до взаимодействия могли быть электрически неактивными). С другой стороны, при формировании неактивных комплексов может происходить потеря донорами и акцепторами их электрической активности.

Из всего сказанного следует, что влияние облучения данного типа на параметры одного и того же полупроводника может быть весьма различным. Эффективность дефектообразования и типы образующихся дефектов зависят от многих факторов, таких как температура и интенсивность облучения, примесный состав и уровень легирования облучаемого материала и т. п. Все эти факторы безусловно могут влиять на процессы вторичного дефектообразования (на миграцию I и V , вероятности взаимодействия с примесями и т. д.). Оказалось, однако, что далеко не всегда рассмотрение только процессов вторичного дефектообразования оказывается достаточным для описания тех или других зависимостей. Во многих случаях необходимо привлекать представления о влиянии условий облучения на процесс генерации свободных V и I . Это заключение отнюдь не является тривиальным, поскольку сечение образования ПФ для данного

вида облучения определяется единственным параметром — пороговой энергией смещения E_d . Полное сечение смещения атома под действием налетающего электрона с энергией E_e получается интегрированием в пределах от пороговой энергии смещения E_d до уже упомянутого значения E_{\max} , оно описывается известной формулой Мак-Кинли и Фешбаха [13]. Таким образом, вопрос о расчетном сечении дефектообразования сводится к вопросу о значении E_d .

Экспериментально E_d может быть в принципе определена путем экстраполяции зависимости скорости (или сечения σ_e) дефектообразования от энергии E_e бомбардирующих электронов к нулевому значению скорости. Этот метод, однако, дает заниженные значения E_d (см. [14]) из-за необходимости использования все более тонких образцов по мере снижения E_e (при попытках приблизиться к порогу дефектообразования). При этом растет вклад поверхностных, слабо связанных атомов и эффективное значение E_d уменьшается. Авторы [14] показали, что расчетные и экспериментальные значения $\sigma_e(E_e)$ не могут быть согласованы ни при каком фиксированном значении E_d ; для того, чтобы согласовать эти зависимости, необходимо считать, что существует распределение атомов решетки по параметру E_d . Расчеты, проведенные в предположении о гауссовом распределении атомов по E_d , показали, что хорошее соответствие может быть получено, если принять максимум распределения соответствующим $E_d=40$ эВ для кремния и $E_d=30$ эВ для германия. Это несколько выше первоначальной оценки Зейтца — $E_d \approx 25$ эВ [15]. Действительно, недавно для кремния при экспериментальном исследовании зависимостей $\sigma_e(E_e)$ удалось получить подтверждение факта «размытия» пороговой энергии и правильности значения $E_d \sim \sim 40$ эВ [16], при котором вероятность смещения атома равна единице.

С другой стороны, E_d может быть оценена путем сравнения расчетного (при заданном E_d) и максимального экспериментально наблюдавшегося значения сечения образования дефектов при γ -облучении ($\sigma_{\gamma}^{\text{экон}}$). Поскольку при γ -облучении дефекты образуются равномерно распределенными по объему образца, значение E_d соответствует «объемной» пороговой энергии смещения атома из регулярного узла решетки.

При этом, однако, надо иметь уверенность в том, что максимальное наблюдавшееся $\sigma_{\gamma}^{\text{экон}}$ совпадает с сечением образования ПФ. Это последнее условие очень трудно выполнить, в частности для кремния, из-за большого разнообразия процессов дефектообразования в этом материале, в котором с примерно равными скоростями образуются взаимно компенсирующие дефекты, I и V одинаково эффективно взаимодействуют с примесными атомами и т. д. В результате, несмотря на огромное число публикаций, посвященных радиационному дефектообразованию в кремнии, сведения об абсолютных значениях $\sigma_{\gamma}^{\text{экон}}$ и $\sigma_e^{\text{экон}}$ для кремния весьма ограничены, во многих работах приводятся лишь данные об относительных изменениях параметров при облучении. Так, максимальное известное авторам настоящего обзора значение $\sigma_{\gamma}^{\text{экон}}=2 \cdot 10^{-26}$ см², полученное в [17], существенно меньше расчетного для $E_d \approx 40$ эВ, которое составляет $8 \cdot 10^{-26}$ см². Это различие с равным основанием может быть отнесено как за счет того, что не все образующиеся дефекты регистрируются, так и за счет того, что большинство ПФ аннигилируют в процессе облучения, не разделившись. Отметим, что, приняв последнее объяснение, можно выдвинуть утверждение, что истинное сечение дефектообразования больше, чем $8 \cdot 10^{-26}$ см², а E_d меньше, чем 40 эВ. Данные [16] исключают такую возможность.

В этом отношении ситуация для германия представляется более ясной. Максимальные наблюдавшиеся $\sigma_{\gamma}^{\text{экон}}$ и $\sigma_e^{\text{экон}}$ хорошо совпадают с расчетными значениями сечений, вычисленными в предположении, что $E_d=30$ эВ. Поскольку методы вычисления сечений для случаев электронного и γ -облучения различны, это совпадение служит дополнительным подтверждением правильности значения $E_d=30$ эВ.

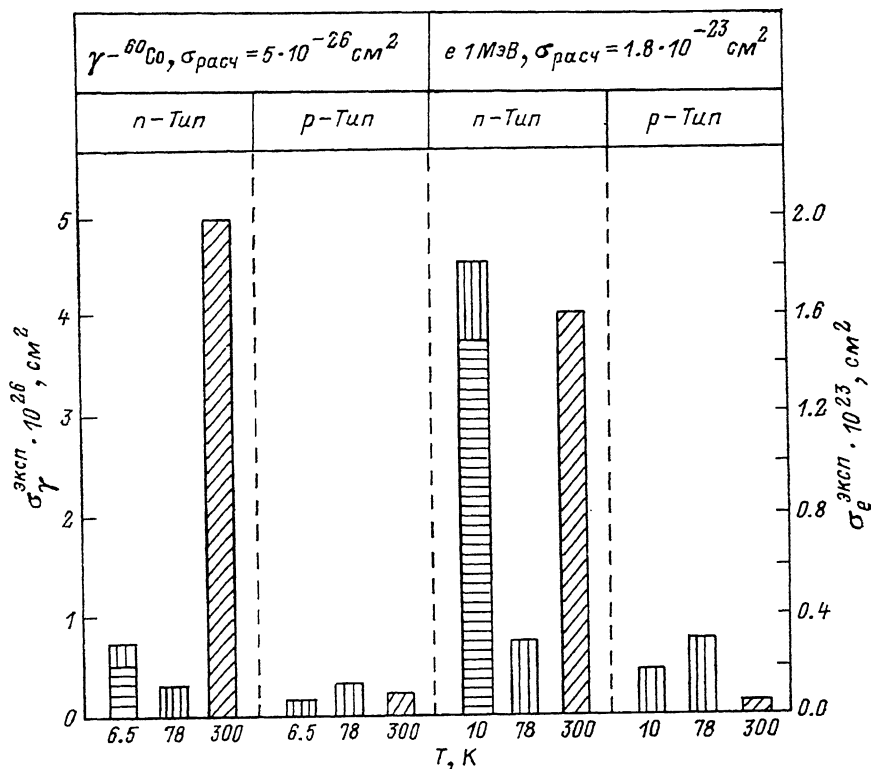


Рис. 1. Расчетные ($\sigma_{\text{расч}}$) и максимальные экспериментально наблюдаемые ($\sigma_{\text{эксп}}$) сечения образования дефектов при облучении германии электронами с энергией ~ 1 МэВ и γ -лучами ^{60}Co .

Поскольку в германии после низкотемпературного облучения возможно экспериментальное наблюдение метастабильных ПФ, оказывается возможным определение сечений их образования ($\sigma_{\text{ПФ}}$). Более того относительная простота вторичного дефектообразования позволяет достаточно надежно указать те экспериментальные ситуации, когда сечения образования наблюдаемых вторичных

Таблица 2

Расчетные и экспериментальные сечения дефектообразования в германии

	Расчетное [14] сечение, см^2 при E_d , эВ		Экспериментальные (максимальные наблюдавшиеся) значения сечений					
			$T < 10 \text{ K}$		$T = 77 \text{ K}$		$T = 300 \text{ K}$	
	для ПФ 30	для V_2 60	n	p	n	p	n	p
γ — ^{60}Co $\sigma \cdot 10^{26}, \text{ см}^2$	5	0.5	а) 0.5 [19] в) 0.2 [19]	б) 0.002 [20] в) 0.15 [20]	в) 0.5 [$^{19}, 21$] —	— в) 0.3 [22]	г) 5 [23] —	в) 0.3 [22] —
Электроны 1 МэВ $\sigma \cdot 10^{23}, \text{ см}^2$	1.6	0.16	а) 1.5 [24] в) 0.3 [14]	в) 0.17 [25]	в) 0.3 [$^{6}, 24$] —	в) 0.3 [25] —	г) 1.6 [27] —	? 0.03 [28] —

Примечание. а) ПФ, электрическая активность которых в n-Ge обусловлена акцепторными состояниями «связанных» вакансий. Центр стадии отжига располагается вблизи 55 К (γ - ^{60}Co) и 65 К (электроны 1 МэВ) б) ПФ, электрическая активность которых в p-Ge обусловлена донорными состояниями связанных межузельных атомов. Отжиг в интервале 35–45 К. в) Дивакансии (V_2) как первичные дефекты и изолированные вакансии, стабильны до ~ 150 К. г) Комплексы вакансии — донор V группы [$V-D^+$].

дефектов соответствуют $\sigma_{\text{Ф}}$. Наконец, оказалось возможным, используя созданную в ФТИ им. А. Ф. Иоффе установку с γ -источниками ^{60}Co [18], получить на германии n - и p -типа с хорошо известным примесным составом значения $\sigma_{\text{Ф}}^{\text{КСИ}}$ при трех температурах облучения (4,2, 78 и 300 К).

Эти данные приведены в табл. 2 и на диаграмме рис. 1 вместе с данными ранних работ по облучению германия электронами. В каждом случае приведены максимальные наблюдавшиеся в соответствующих условиях значения $\sigma_{\text{Ф}}^{\text{КСЛ}}$ и $\sigma_{\text{Ф}}^{\text{КМ}}$. Заметим, что интенсивность электронного облучения существенно выше, чем γ -облучения, и данные табл. 2 позволяют делать определенные заключения о влиянии этого параметра на эффективность дефектообразования.

При рассмотрении табл. 2 и диаграммы возникает целый ряд вопросов. Так, простому объяснению не поддается зависимость сечений от типа проводимости германия, интенсивности облучения. Специального обсуждения требует немонотонный характер их температурной зависимости. Оказалось, что ответы на все эти вопросы могут быть найдены с помощью анализа процессов аннигиляции и разделения V и I , а также механизмов их миграции. Далее обсуждается проблема взаимодействия V и I , вопрос об их энергетических спектрах и их роли в процессах вторичного дефектообразования в кремнии и германии.

1. Теория

В этом разделе рассмотрены факторы, определяющие область неустойчивости ПФ, от параметров которой зависит интенсивность процессов гомогенной аннигиляции; в пределах области возможно заметное возмущение энергетического спектра I и V . Рассмотрение проведено в приближении анизотропного упругого континуума (с макроскопическими упругими константами), что допустимо, если расстояние r между I и V существенно превышает межатомное расстояние в кристалле ($r \gg a$). Для упрощения рассмотрения оба дефекта считаются изотропными центрами дилатации (широко используемое приближение, см., например, [29]). Это приближение, не являясь принципиально важным для обсуждаемых модельных представлений, значительно облегчает расчеты. Кроме того, при таком подходе мы не будем принимать во внимание особенности электронной структуры собственных дефектов, в предлагаемой модели учитывается только величина заряда на них (приближение точечных зарядов). Принята кристаллографическая система координат с центром на вакансии; собственный межузельный атом находится в точке, задаваемой радиусом-вектором r . Энергия взаимодействия I и V определяется двумя вкладками — энергией деформационного и электростатического взаимодействия.

Электростатическое взаимодействие характеризуется двумя составляющими: помимо кулоновского притяжения (например, в парах $[V^{-}I^{+}]$), возможно их взаимодействие через поляризацию среды; последняя в свою очередь может проявиться как при наличии заряда на одном из дефектов (например, $[V^{-}I^0]$), так и вследствие неоднородной деформации кристаллической решетки вокруг рассматриваемых дефектов (даже для пар $[V^0I^0]$). Если первый тип поляризации хорошо известен, то второй требует некоторых пояснений, см. также [30–34].

При деформации среды ее электрическая поляризация \mathcal{P}_i может быть представлена в виде

$$\mathcal{P}_i = -\beta_{ijk} u_{jk} + g_{ijkl} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k \partial x_l} + \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} \right), \quad (1)$$

где u_{jk} — тензор деформации, β_{ijk} — тензор пьезоэлектрических модулей, g_{ijkl} — тензор флексоэлектрических модулей; суммирование ведется по повторяющимся индексам. При этом предполагается, что $ka \ll 1$, где k — характеристическая абсолютная величина волнового вектора в фурье-разложении деформации.

В кристаллах без центра симметрии пьезоэлектрические модули отличны от нуля и при однородной деформации ($d^2u_j/dx_k dx_l=0$) имеет место обычный пьезоэлектрический эффект; последний доминирует и при неоднородной деформации ($d^2u_j/dx_k dx_l \neq 0$), так как отношение второго слагаемого в (1) к первому порядка ka . Однако положение меняется для кристаллов с центром симметрии (кремний, германий), для которых обычный пьезоэлектрический эффект отсутствует ($\beta_{ijk}=0$). Тем не менее неоднородная деформация может вызвать пьезоэлектрический эффект другого типа (так называемый флексоэлектрический эффект), поскольку в такой среде флексоэлектрические модули g_{ijkl} отличны от нуля; в кубических кристаллах число независимых компонент тензора уменьшается до трех ($g_{1111}, g_{1122}, g_{1212}$). Этот эффект был предсказан теоретически К. Б. Толпыго с сотрудниками [30, 31] и исследован затем другими авторами [32-34]. Для качественного рассмотрения энергии взаимодействия I и V можно использовать оценку $|g_{ijkl}| \sim e/a$ (где e — заряд электрона) [32].

Для того чтобы вычислить полную энергию взаимодействия между I и V , необходимо записать условия равновесия твердого тела с заряженными дефектами:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{D}_i}{\partial x_i} &= 4\pi\rho(\mathbf{r}), \\ \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь \mathcal{D}_i — компонент вектора электрической индукции, $\rho(\mathbf{r})$ — плотность заряда, σ_{ik} — тензор механических напряжений. Далее для нахождения \mathcal{D}_i и σ_{ik} используется формула для плотности свободной энергии F рассматриваемой системы:

$$F = F_0 + \frac{1}{2} \lambda_{klij} u_{kl} u_{ij} - O_{kl} u_{kl} C(\mathbf{r}) - \frac{1}{8\pi} \epsilon_{ij} E_i E_j - \frac{1}{2} E_i (g_{iklm} u_{kl, m} + g_{ilkm} u_{lk, m}) + \beta_{ikl} E_i u_{kl},$$

так как известна связь этой величины с \mathcal{D}_i и σ_{ik} [35]:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_i &\equiv -4\pi \left(\frac{\partial F}{\partial E_i} \right)_{T, u_{kl}, C}, \\ \sigma_{ik} &\equiv \left(\frac{\partial F}{\partial u_{kl}} \right)_{T, E, C}, \end{aligned} \quad (3)$$

где E_i — соответствующий компонент вектора электрического поля, C — концентрация дефектов, $O_{ik} = K\Omega_{ik}$, K^{-1} — коэффициент всестороннего сжатия, Ω_{ik} — интенсивность центров дилатации, ϵ_{ij} — диэлектрический тензор, λ_{iklm} — тензор упругих модулей; индекс после запятой в $u_{kl, m}$ означает дифференцирование по соответствующей координате. На этом пути уравнения (2) преобразуются к другому виду и содержат в явном виде характеристические параметры системы

$$\begin{aligned} -\epsilon_{ij} \nabla_i \nabla_j \varphi + 4\pi g_{iklm} u_{kl, im} - 4\pi \beta_{ijl} \nabla_i \nabla_j u_l = 4\pi \rho(\mathbf{r}), \\ \lambda_{klij} u_{ij, l} - \frac{1}{2} (g_{iklm} + g_{ilkm}) \nabla_i \nabla_l \nabla_m \varphi - \beta_{ikl} \nabla_l \nabla_i \varphi = O_{kl} \nabla_l C(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4)$$

где $\varphi(\mathbf{r})$ — электростатический потенциал, создаваемый дефектом.

Далее мы воспользуемся тем обстоятельством, что для кристаллов кубической симметрии (в кристаллографической системе координат) [35, 36]

$$\lambda_{iklm} = \lambda \delta_{ik} \delta_{lm} + G (\delta_{il} \delta_{mk} + \delta_{im} \delta_{kl}) + \mu \sum_{p=1}^3 \delta_{ip} \delta_{kp} \delta_{lp} \delta_{mp};$$

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_0 \delta_{ij}, \quad (5)$$

$$\beta = \beta_{xyx} = \beta_{xyy} = \beta_{yxx} = \beta_{yxy} = \beta_{zyx} = \beta_{zyy}; \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j, \\ 0 & i \neq j. \end{cases}$$

Согласно [35], для кристаллов точечной группы T_d , O , O_h тензор g_{iklm} имеет такой же вид, как и λ_{iklm} в (5), если заменить упругие модули λ , G , μ на флексоэлектрические модули G_1 , G_2 , G_3 . Для преобразования уравнений (4) учтем, что для среды с центром симметрии, т. е. для рассматриваемых здесь полупроводников, $\beta_{ikl} = 0$. В целях упрощения расчетов будем представлять дефекты как изотропные центры дилатации $\Omega_{kl} = \Omega_0 \delta_{kl}$, у которых интенсивность Ω_0 практически не зависит от зарядового состояния (приближение, позволяющее качественно обсудить ситуацию). В действительности, характер релаксации решетки более сложен и во многом достоверно неизвестен. С учетом (5) и $u_{i;k} = \frac{1}{2} (\nabla_i u_k + \nabla_k u_i)$ система уравнений (4) может быть записана в виде

$$\Delta \varphi = -\frac{4\pi}{\varepsilon} Ze \delta(\mathbf{r}) + \frac{4\pi}{\varepsilon} [(G_1 + 2G_2) \Delta \operatorname{div} \mathbf{u} + G_3 (\nabla_x^2 u_x + \nabla_y^2 u_y + \nabla_z^2 u_z)], \quad (6)$$

$$(\lambda + G + \mu) \Delta_x^2 u_x - G \Delta u_x + (\lambda + G) (\nabla_x \nabla_y \nabla_y + \nabla_x \nabla_z \nabla_z) - [G_3 \nabla_x^3 \varphi + (G_1 + 2G_2) \Delta \nabla_x \varphi] = K \Omega_0 \nabla_x \delta(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где Ze — заряд дефекта, а $C(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$, $\rho(\mathbf{r}) = Ze \delta(\mathbf{r})$. Тем самым определено положение дефекта и его заряд. Полную систему уравнений получим, если к (6) и (7) добавим еще два уравнения, произведя в (7) замены: $(x \rightleftharpoons y)$ и $(x \rightleftharpoons z)$. Решение полной системы уравнений удобнее искать на основе преобразований Фурье:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \Xi_0(\xi) \exp(i\xi \mathbf{r}) d\xi; \quad (8)$$

$$u_l(\mathbf{r}) = \int \Xi_l(\xi) \exp(i\xi \mathbf{r}) d\xi, \quad l = 1, 2, 3 (x, y, z).$$

Далее приводится окончательное выражение для $\varphi(\mathbf{r})$ (решение и анализ промежуточных выкладок см. [37]):

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{Ze}{\varepsilon r} + \frac{4\pi(G_1 + 2G_2 + G_3)}{\varepsilon(\lambda + 2G + \mu)} K \Omega_0 \mathcal{J}_1(\mathbf{r}) - \frac{4\pi Ze \Lambda_0^2}{\varepsilon} \mathcal{J}_2(\mathbf{r}), \quad \Lambda_0^2 = \frac{4\pi}{\varepsilon} \frac{(G_1 + 2G_2 + G_3)^2}{(\lambda + 2G + \mu)}. \quad (9)$$

Происхождение первого слагаемого очевидно, второй и третий члены отражают вклад флексоэлектрического эффекта.

Аналогичным образом может быть найдено выражение для среднего гидростатического давления, вызываемого дефектом, $P(\mathbf{r}) = -Ku_{ii}(\mathbf{r})$ [38]:

$$P(\mathbf{r}) = -\frac{K^2 \Omega_0}{(\lambda + 2G + \mu)} \mathcal{J}_3(\mathbf{r}) - \frac{4\pi K (G_1 + 2G_2 + G_3)}{\varepsilon(\lambda + 2G + \mu)} Ze \mathcal{J}_1(\mathbf{r}) \quad (10)$$

(в рассматриваемой модели давление не является изотропной величиной).

Далее приведены выражения для интегралов, встречающихся в (8) и (9),

$$\mathcal{J}_{1,2,3}(\mathbf{r}) = -\frac{\pi}{(2\pi)^3} \nabla_r^2 \left[\frac{1}{r} \int_0^{2\pi} q_{1,2,3}(\theta) d\psi_\theta \right]. \quad (11)$$

При вычислении интегралов при фурье-преобразованиях использовалось разложение единичного вектора $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\xi}/\xi$, см. (8), в системе взаимно перпендикулярных направлений, задаваемых двумя единичными векторами $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ и \mathbf{e} . Угол ψ_θ лежит в плоскости, перпендикулярной к единичному вектору \mathbf{n} , и отсчитывается

от полупрямой, лежащей в плоскости (xy) и перпендикулярной к n ; если θ и α — полярный и азимутальный углы вектора n соответственно, то компоненты единичного вектора e равны [38]

$$\begin{aligned} e_x &= \cos \psi_e \sin \alpha - \sin \psi_e \cos \theta \cos \alpha, \\ e_y &= -\cos \psi_e \cos \alpha - \sin \psi_e \cos \theta \sin \alpha, \\ e_z &= \sin \psi_e \sin \theta. \end{aligned} \quad (12)$$

Функции $q_1, 2, 3$ определены далее:

$$\begin{aligned} q_1(e) &= \frac{1 + L_2(e)}{1 - L_1(e)}; \quad q_2(e) = \frac{1}{1 - L_1(e)}; \quad q_3(e) = \frac{1 + L_3(e)}{1 - L_1(e)}; \\ L_1(e) &= \frac{\mu(2\lambda + 2G + \mu)}{G(\lambda + 2G + \mu)} (e_x^2 e_y^2 + e_x^2 e_z^2 + e_y^2 e_z^2) + \frac{\mu^2(3\lambda + 3G + \mu)}{G^2(\lambda + 2G + \mu)} e_x^2 e_y^2 e_z^2; \\ L_2(e) &= -\frac{2[G_3(G + \mu) - \mu(G_1 + 2G_2)]}{G(G_1 + 2G_2 + G_3)} (e_x^2 e_y^2 + e_x^2 e_z^2 + e_y^2 e_z^2) + \\ &+ \frac{\mu[6GG_3 + \mu(2G_1 + 6G_2 + G_3)]}{G^2(G_1 + 2G_2 + G_3)} e_x^2 e_y^2 e_z^2 + \frac{3G_3\mu}{G(G_1 + 2G_2 + G_3)} (e_x^1 e_y^2 + e_x^1 e_z^2 + e_y^1 e_x^2 + \\ &+ e_y^1 e_z^2 + e_z^1 e_x^2 + e_z^1 e_y^2); \\ L_3(e) &= \frac{2\mu}{G} (e_x^2 e_y^2 + e_x^2 e_z^2 + e_y^2 e_z^2) + \frac{3\mu}{G^2} e_x^2 e_y^2 e_z^2. \end{aligned} \quad (13)$$

Согласно анализу [37], формулами (9) и (10) можно пользоваться, если $r \gg a$ и $(\Lambda_0/r)^2 \ll 1$. Первое условие с необходимостью выполняется, так как мы исходим из приближения непрерывной среды. Второе условие выполняется, так как для кремния и германия $\Lambda_0 \approx a$.

После того как мы определили электростатический потенциал $\varphi(r)$ и среднее гидростатическое давление $P(r)$ для точечных дефектов, мы можем оценить энергию взаимодействия собственных дефектов в паре Френкеля, если один дефект охарактеризуем величинами $\varphi(r)$ и $P(r)$, а другой — зарядом $\tilde{Z}e$ и интенсивностью дилатации $\tilde{\Omega}_0$:

$$U(r) = \varphi(r) \tilde{Z}e - P(r) \tilde{\Omega}_0. \quad (14)$$

Отметим две особенности в зависимости $U(r)$. Во-первых, вклад флексоэлектрического эффекта быстро убывает с расстоянием от дефекта ($\sim r^{-3}$) [см. (9)—(11)]. Во-вторых, энергия взаимодействия зависит не только от расстояния между дефектами, но и от их взаимного расположения [см. (11)—(13)]; знакопеременность слагаемых в (14) является следствием анизотропии свойств кристаллов [см. (5) и далее]. Поэтому оценки $U(r)$ проведены для тех углов θ и α , при которых энергия взаимодействия дефектов (14) максимальна (для германия и кремния $\theta = 55^\circ$, $\alpha = 45^\circ$).

В качестве иллюстрации на рис. 2 приведены расчетные зависимости $U(r)$ для пары Френкеля в германии, а на рис. 3 — зависимость $P(r)$ для собственного межузельного атома. При расчетах были использованы следующие параметры: $\lambda = 4.8 \cdot 10^{10}$ Па, $G = 6.9 \cdot 10^{10}$ Па, $\mu = -5.3 \cdot 10^{10}$ Па, $K = 8 \cdot 10^{10}$ Па (упругие модули взяты из работы [39]); относительная диэлектрическая проницаемость $\epsilon = 16$, флексоэлектрические модули $G_{1, 2, 3} \approx e/a$, см. выше; $\Omega_0 = (\Delta \mathcal{V} / \mathcal{V}) \frac{1}{N}$ (где $\Delta \mathcal{V} / \mathcal{V}$ — относительное изменение объема на один дефект, N — концентрация регулярных атомов), для задания интенсивности дилатации, обусловленной дефектами, мы полагали «радиус» вакансии $R_V \approx 1 \text{ \AA}$, а для межузельного атома $R_I \approx 2 \text{ \AA}$ (учитывая возможность образования «связанных» и «расщепленных» межузельных конфигураций), тетраэдрический ковалентный

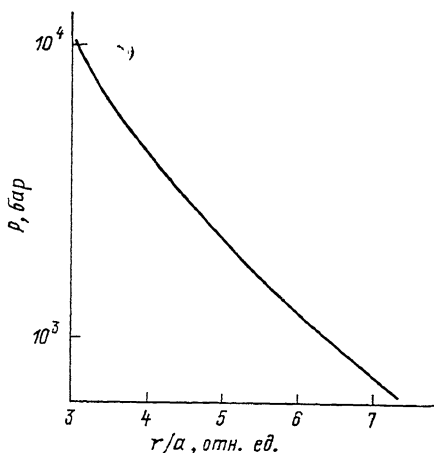
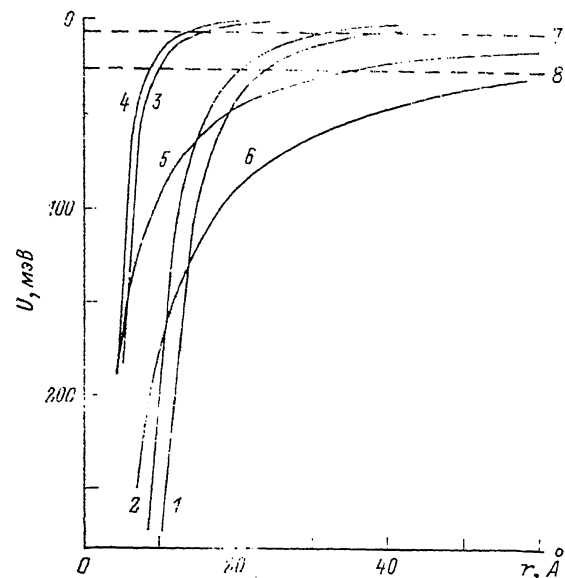


Рис. 2. Расчетные зависимости энергий взаимодействия между компонентами ПФ $U^{V^{\pm}I^{\pm}}$ и $U^{V^{\pm}I^{\pm}}$ от расстояния между V и I для германия.

$U^{V^{\pm}I^{\pm}}$: 1 — $[V^{-}I^{0}]$, 2 — $[V^{-}I^{+}]$, 3 — $[V^{0}I^{+}]$, 4 — $[V^{0}I^{0}]$.
 $U^{V^{\pm}I^{\pm}}$: 5 — $[V^{-}I^{+}]$, 6 — $[V^{-}I^{+}]$.

Рис. 3. Среднее гидростатическое давление, создаваемое в кристаллической решетке германия собственным межузельным атомом I^{0} .

радиус $R_{Ge} = 1.22 \text{ \AA}$; для упрощения расчетов Ω_0 считалась независимой от зарядового состояния дефектов, т. е. рассматривалась как некая средняя величина. Заметим также, что оценочные расчеты для кремния дают подобные результаты, поскольку параметры Si и Ge не слишком отличаются; кремний более «жесткий» материал: $\lambda = 6.4 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, $G = 7.9 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, $\mu = -5.7 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, $K = 9.8 \cdot 10^{10} \text{ Па}$ [39]; $\epsilon = 11.8$; остальные параметры см. выше, $R_{Si} = 1.18 \text{ \AA}$. Какие же заключения можно сделать из проведенного анализа?

Во-первых, реальный масштаб пространственного разделения компонентов ПФ в кремнии и германии, при котором парциальные вклады деформационного и флексоэлектрического эффектов в энергию взаимодействия $U(r)$ могут быть существенными (несколько десятых эВ), составляет около двух постоянных кристаллической решетки.²

Во-вторых, размер зоны неустойчивости ПФ по отношению к аннигиляции зависит от зарядовых состояний I и V , в том числе и для пар с одним нейтральным компонентом, например $[V^{-}I^{0}]$ и $[V^{0}I^{+}]$. Действительно, зона неустойчивости определяется как область, на границе которой $|U(r)| \approx kT$. Это, строго говоря, справедливо только для кулоновского взаимодействия двух заряженных дефектов, например $[V^{-}I^{+}]$ (без экранировки) [40]; однако из общих физических соображений указанный критерий может быть использован и в других случаях, по крайней мере для качественного анализа. Из рис. 2 видно, что самый большой радиус зоны неустойчивости характерен для кулоновского притяжения противоположно заряженных компонентов ПФ (пока для простоты будем считать такую зону сферической, см. далее). Следующим по силе взаимо-

² По грубым оценкам, максимальный вклад обычной (т. е. наведенной зарядом) поляризации не превышает половины от вклада флексоэлектрического эффекта и в настоящей работе не учитывался; учет этого вклада не изменил бы качественно ситуацию, но вызвал бы дополнительные трудности при расчетах.

действия оказывается взаимодействие типа «заряд—поляризация», например, в паре $[V-I^0]$ или $[V-I^0]$; за счет дальнего действия «голового» заряда радиус зоны неустойчивости для пар $[V-I^0]$ и $[V-I^0]$ все-таки больше, чем радиус «захвата» для нейтральных собственных дефектов $[V^0I^0]$. Другая особенность рассматриваемой модели ПФ заключается в том, что собственный межузельный атом, вызывая большую деформацию кристаллической решетки, чем вакансия, обуславливает и более сильную поляризацию среды, поэтому и зона неустойчивости для пар $[V-I^0]$ оказывается большей, чем для пар $[V^0I^+]$ (рис. 2).

Кроме того, из рис. 2 видно, что эффективный выход свободных V и I , т. е. количество разделившихся ПФ, сильно зависит от внешних условий (температура, концентрация основных и неосновных носителей заряда, энергия облучающих частиц и т. п.). Поясним это на некоторых примерах.

Действительно, радиусы захвата вакансией собственных межузельных атомов, существенные для процесса аннигиляции, суть константы материала при заданной температуре, поэтому увеличение энергии бомбардирующих электронов, приводящее к увеличению среднего расстояния между V и I , в общем увеличивает долю ПФ, «выпадающих» за радиус захвата. Однако этот эффект для электронов с энергией несколько МэВ, по-видимому, не очень силен. Машинное моделирование для облученных металлов [41] показывает, что среднее расстояние между V и I возрастает относительно слабо при увеличении энергии быстрых электронов E_e ; вывод о слабой энергетической зависимости параметра распределения ПФ для германия был сделан в [42].

При повышении температуры уменьшается размер зоны неустойчивости (рис. 2) из-за увеличения средней тепловой энергии собственных дефектов, разрывающей их направленное движение на краю зоны; при этом возможно, конечно, изменение и коэффициентов диффузии вследствие изменения температуры и/или зарядового состояния. Кроме того, изменение зарядового состояния V и I , происходящее за время жизни ПФ, может радикально изменить ее судьбу. Так, например, после рождения нейтральной пары $[V^0I^0]$ с расстоянием между компонентами, большим, чем минимальный радиус захвата I^0 нейтральной вакансией, неподвижной при низкой температуре, разделение пары может и не произойти, если вакансия за время жизни пары успевает перезарядиться $[V^0I^0] \rightarrow [V-I^0]$, тем самым увеличив свой радиус захвата (рис. 2).

Из приведенных примеров ясно, что сечения образования вторичных дефектов, вообще говоря, могут сложным образом (отнюдь не монотонно) зависеть от внешних условий, в частности от повышения температуры облучения. Развитый здесь подход позволяет качественно, а при знании основных характеристик собственных дефектов и количественно, описать экспериментально наблюдаемые процессы радиационного дефектообразования.

Далее, на основе рассматриваемых модельных представлений можно оценить по порядку величины возмущение энергетического спектра нейтральных собственных дефектов, связанных в ПФ, за счет давления, возникающего при неоднородной деформации кристаллической решетки. При этом для оценки $P(r)$ мы будем использовать величину среднего гидростатического давления (10). Как видно из рис. 3, при выбранных параметрах давление, оказываемое собственным межузельным атомом, составляет несколько килобар на расстоянии двух постоянных решетки; давление, производимое вакансией, меньше по крайней мере на порядок величины при принятой здесь интенсивности дилатации. Пьезочувствительность изолированной вакансии неизвестна, но влияние одноосной деформации на энергию ионизации различных примесных центров и структурных дефектов хорошо изучено для кремния (см., например, [43, 44]). В этих работах показана, в частности, высокая чувствительность комплексов вакансионного типа к давлению из-за локального смягчения кристаллической решетки. Так, в зависимости от направления приложенной упругой деформации сдвиг уровня A -центра лежит в диапазоне от нескольких мэВ/кбар до

30 мэВ/кбар. В этом отношении германий исследован слабее, но пьезочувствительность вакансионных дефектов в германии может быть выше вследствие более низких значений упругих констант; например, по данным [45], сдвиг уровня $E_c - 0.2$ эВ, принадлежащего комплексу радиационного происхождения в n -Ge, составляет несколько десятков мэВ/кбар. В любом случае сдвиг энергетических состояний вакансии, входящей в состав ПФ, может быть значительным — от нескольких сотых до десятой эВ, отметим, что указанный порядок величины удовлетворительно согласуется с приводимой далее величиной сдвига верхнего акцепторного уровня связанной вакансии в кремнии. Напротив, для нейтрального межузельного атома мы не ожидаем значительного возмущения его энергетических состояний.

Обсудим теперь вопрос о влиянии внешних условий (прежде всего интенсивности и температуры облучения) на величину той доли пар Френкеля, которая аннигилирует во время облучения.

Пусть концентрация ПФ мала, так что каждая пара может рассматриваться как изолированная. Выберем из ансамбля таких пар одну, компоненты которой $V^{(i)}$ и $I^{(j)}$. Среднестатистическая энергия взаимодействия компонентов может быть записана в виде

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{ij} f_{ij}(\mathbf{r}) U_{ij}(\mathbf{r}), \quad (15)$$

где $f_{ij}(\mathbf{r})$ — вероятность того, что $I^{(j)}$ имеет координату \mathbf{r} , а $V^{(i)}$ находится в точке $\mathbf{r}=0$; U_{ij} определяется уравнениями (9), (10), (14).

Выделим область $\mathbf{r} \in S$ вокруг вакансии, для которой $U(\mathbf{r}) \leq \Psi < 0 \times \times (|\Psi| \approx kT)$. Внутри этой области есть область спонтанной аннигиляции и периферийные области (вообще говоря, многосвязные), в пределах которых V и I аннигилируют благодаря движению I к V (диффузионного или дрейфового). Объем периферийной части может быть чувствительным к условиям облучения и вследствие этого будет основным объектом рассмотрения (размер области спонтанной аннигиляции постояен и мы не будем здесь обсуждать эту область).

Вероятность того, что $I^{(j)}$, находясь на расстоянии \mathbf{r} ($|\mathbf{r}| > r^*$) от вакансии $V^{(i)}$, проаннигилирует с ней, может быть представлена, как

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in \mathcal{V}_S, \\ 0, & \mathbf{r} \notin \mathcal{V}_S. \end{cases}$$

Обозначим через $w(\mathbf{r})$ вероятность того, что после выхода из узла межузельный атом расположен в точке \mathbf{r} . Тогда доля проаннигилировавших ПФ (нормированная к единице) равна

$$\gamma = \int_{\mathcal{V}_S} w(\mathbf{r}) \Gamma(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{\mathcal{V}_S} w(\mathbf{r}) d\mathcal{V}_S.$$

Определение абсолютного значения γ не является задачей настоящей работы, задача состоит в том, чтобы качественно описать зависимость γ от условий облучения; следовательно, мы можем использовать модельную функцию в виде

$$w(\mathbf{r}) = \begin{cases} \text{const} \neq 0, & r^* \leq |\mathbf{r}| \leq R, \\ 0, & |\mathbf{r}| < r^*, |\mathbf{r}| > R. \end{cases}$$

Здесь R — максимальное пространственное разделение между V и I в парах Френкеля после их генерации. Отсюда следует, что

$$\gamma = \frac{3\mathcal{V}'_S}{4\pi[R^3 - (r^*)^3]},$$

$$\text{где } \mathcal{V}'_S = \begin{cases} \mathcal{V}_S, & \text{если } \max \{ |r| \in \mathcal{V}_S \} \leq R, \\ \tilde{\mathcal{V}}_S, & \text{если } \max \{ |r| \in \mathcal{V}_S \} > R. \end{cases} \quad (16)$$

Это означает, что \mathcal{V}'_S содержит ту долю объема \mathcal{V}_S , для которого $|r| \leq R$. Чтобы исследовать зависимость \mathcal{V}'_S от условий облучения, необходимо определить $f_{i,j}(\mathbf{r})$. В соответствии с [46] могут быть использованы рекуррентные соотношения

$$f_{i,j}(\mathbf{r}) = A_{i,j}(\mathbf{r}) f_{i-1,j}(\mathbf{r}) + B_{i,j}(\mathbf{r}) f_{i,j-1}(\mathbf{r}), \quad (17)$$

где

$$A_{i,j}(\mathbf{r}) = \frac{\alpha_{ni}(n_0 + \Delta n) + \alpha_{pi} p_0 \frac{f_{i,j}^0(\mathbf{r})}{f_{i-1,j}^0(\mathbf{r})}}{(p_0 + \Delta p)(\tilde{\alpha}_{pj} + \alpha_{pi}) + M_{i,j}(\mathbf{r})},$$

$$B_{i,j}(\mathbf{r}) = \frac{\tilde{\alpha}_{nj}(n_0 + \Delta n) + \tilde{\alpha}_{pj} p_0 \frac{f_{i,j}^0(\mathbf{r})}{f_{i,j-1}^0(\mathbf{r})}}{(p_0 + \Delta p)(\tilde{\alpha}_{pj} + \alpha_{pi}) + M_{i,j}(\mathbf{r})},$$

$$M_{i,j}(\mathbf{r}) = \left\{ \frac{\alpha_{ni} f_{i-1,j}^0(\mathbf{r})}{f_{i,j}^0(\mathbf{r})} + \frac{\tilde{\alpha}_{nj} f_{i,j-1}^0(\mathbf{r})}{f_{i,j}^0(\mathbf{r})} \right\} n_0.$$

Здесь n_0 и p_0 — равновесные концентрации электронов и дырок, Δn и Δp — концентрации неравновесных электронов и дырок, $\tilde{\alpha}_{ni}$ и $\tilde{\alpha}_{nj}$ — скорости захвата электронов на $V^{(i-1)}$ и на $I^{(j-1)}$ соответственно, α_{pi} и $\tilde{\alpha}_{pj}$ — скорости захвата дырок на $V^{(i)}$ и на $I^{(j)}$ соответственно. Равновесная степень заполнения двух взаимодействующих дефектов может быть записана как

$$f_{i,j}^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{C} \exp \left\{ \frac{(i+j)\mu^* - E_i^V - E_j^I - U_{i,j}(\mathbf{r})}{kT} \right\}, \quad (18)$$

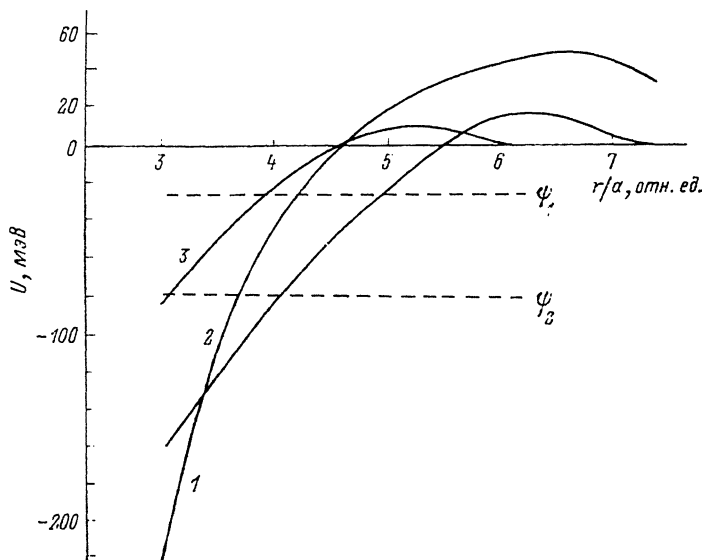


Рис. 4. Расчетная зависимость среднестатистической энергии взаимодействия компонентов ПФ от расстояния между V и I для n -Si (с удельным сопротивлением 1 Ом·см) при комнатной температуре.

$\theta = 55^\circ$, $\chi = 45^\circ$, a — межатоомное расстояние. Коэффициент инжекции $\beta = \Delta n/n_0$: 1 — 10^3 , 2 — 1, 3 — 10^{-1} . Штриховая линия: $\Psi_1 = -kT$, $\Psi_2 = -3 kT$.

Рис. 5. Расчетные зависимости критического радиуса аннигиляции компонентов ПФ от β для n -Si (1 Ом·см) при комнатной температуре.

$\theta = 55^\circ$, $\alpha = 45^\circ$, a — межатомное расстояние. Ψ : 1 — $-0.5 kT$, 2 — $-kT$, 3 — $-3 kT$, $U \leq \Psi$.

где μ^* — равновесный уровень Ферми, T — температура кристалла, E_i^V и E_j^I — энергии $V^{(i)}$ и $I^{(j)}$ соответственно.

$$C = \sum_{\{ij\}} \exp \left\{ \frac{(i+j)\mu^* - E_i^V - E_j^I - U_{ij}(r)}{kT} \right\}. \quad (19)$$

Выражение (18) было получено тем же способом, что и выражение для стационарного неравновесного уровня заполнения изолированного дефекта.

Для примера обсудим кратко зависимость γ от интенсивности облучения Y . Изменения Y приводят к изменению Δn и Δp , которые в свою очередь сопровождаются изменениями $f_{ij}(r)$ и $U(r)$ [см. (15) и (17)]. Вследствие этого \mathcal{V}'_s и γ также изменяются в соответствии с (16).

На рис. 4 показана расчетная зависимость среднестатистической энергии взаимодействия компонентов ПФ $U(r)$ от их пространственного разделения для n -Si. Как видно из рисунка, существует область аннигиляции, для которой $r^* < r \leq (r)_{r=\Psi} \equiv F$ (здесь $|\Psi|$ приблизительно равно kT ; для примера на рис. 4 приведены $\Psi_1 = -kT$ и $\Psi_2 = -3 kT$).

На рис. 5 показана расчетная зависимость \bar{r} ($\theta = 55^\circ$ и $\alpha = 45^\circ$) от параметра инъекции $\beta = \Delta n/n_0$ для n -Si. Форма расчетных кривых для различных θ и α качественно одинакова при условии, что $U \leq \Psi$.

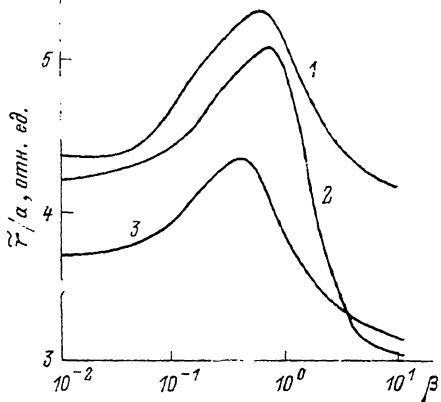
Точно таким же будет характер зависимости \mathcal{V}'_s и γ (доли проаннигилировавших ПФ) от β . Для простоты вычислений при определении $f_{ij}(r)$ мы полагаем, что $\alpha_{ni} = \alpha_{pi} = \bar{\alpha}_{nj} = \bar{\alpha}_{pj}$. С учетом того, что существует ряд свободных параметров, такое приближение может быть разумным для модели, которая обеспечивает качественное объяснение экспериментальных результатов.

2. Экспериментальные данные

2.1. Вакансия и собственный межузельный атом. Энергетический спектр.

На рис. 6 схематически показаны энергетические спектры V и I для Si и Ge, полученные с помощью детального анализа литературных данных, который был выполнен в [47, 48]. Особенность этих спектров состоит в различии набора уровней, принадлежащих, с одной стороны, изолированным собственным дефектам, а с другой — входящим в состав близкой ПФ. По причинам, рассмотренным выше, энергетические спектры возмущены не только для заряженных дефектов, но и для нейтральной ПФ — $[V^0I^0]$, а также в тех случаях, когда заряженным оказывается один из компонентов, например $[V^-I^0]$, $[V^0I^+]$.

В кремнии изолированная вакансия является амфотерным многозарядным центром ($V^-/V^-/V^0/V^+/V^{++}$) [49]. Донорные состояния V^0 , V^+ и V^{++} образуют систему с отрицательной корреляционной энергией [49, 50]; ее уровень заполнения $E_v + 0.078$ эВ [51]. Энергетические параметры этой системы следующие: собственное значение энергии для состояния $V^{++} - E_L \approx E_v + 0.29$ эВ, энергия отталкивания двух электронов, локализованных на V^0 , приблизительно равна $E_{\text{кх}} \approx 0.23$ эВ, энергия ян-теллеровского сдвига для V^+ сравнима с $E_{\text{кх}}$ ($E_{\text{кх}} \approx$



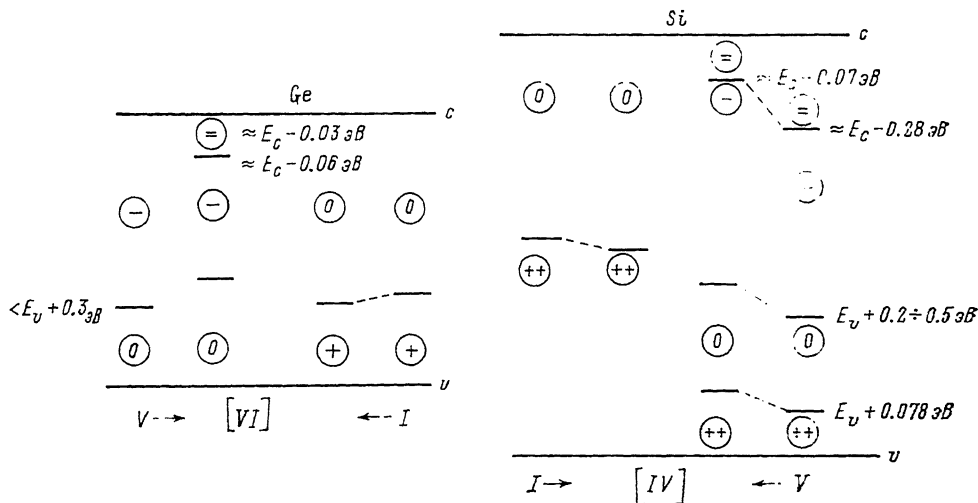


Рис. 6. Энергетические состояния изолированных компонентов ПФ, а также V и I, входящих в состав метастабильной «близкой» ПФ.

В последнем случае спектры собственных дефектов возмущены вследствие возникновения упругих напряжений.

$\approx 0.17 \text{ эВ}$), таким образом, эффективная отрицательная корреляционная энергия двух электронов, локализованных на V^0 , составляет $E_{\text{корр}}^{\text{эфф}} \approx -0.1 \text{ эВ}$; все параметры оценены с использованием уравнений, записанных в [50], и экспериментальных результатов [49, 51].

Результаты, полученные в [52], а также в [53, 54] при исследовании кинетики образования дефектов в *n*-Si в условиях γ -облучения ^{60}Co при 78 и 300 К дают основания утверждать, что верхний акцепторный уровень изолированной вакансии в кремнии расположен далеко от края зоны проводимости ($\approx E_c - 0.28 \text{ эВ}$). Это является дополнительным аргументом в пользу представления о том, что близкая пара Френкеля характеризуется значительным возмущением энергетического спектра (см., кроме того, [49]). С учетом приведенных выше оценок давления, создаваемого I^0 , верхний уровень вакансии (V^{--}) может быть смещен в близкой паре до значения $\approx E_c - 0.07 \text{ эВ}$, такой энергией характеризуется хорошо известная [55] зависимость скорости образования дефектов от температуры в *n*-Si.

С помощью машинного моделирования предсказано, что донорные состояния межузельного атома кремния (I^0, I^+, I^{++}) могут представлять собой систему с отрицательной корреляционной энергией. Последнее в свою очередь может обеспечить практически атермическое движение собственного межузельного атома в неравновесных условиях [10, 11].

В литературе нет разногласий относительно того, что вакансия в *n*-Ge обладает акцепторными свойствами. Разногласия возникают при обсуждении конкретных зарядовых состояний. Первая работа [24], в которой была сделана попытка определения зарядового состояния собственных дефектов в *n*-Ge после облучения быстрыми электронами при $T < 10 \text{ К}$, опиралась на изучение зависимости времени захвата горячих электронов на эти центры от напряжения греющего электрического поля. В [24] был сделан вывод, что образующиеся при облучении *n*-Ge дефекты эффективно проявляются как двойные акцепторы, которые были отождествлены с замороженными вакансиями. Такая точка зрения получила широкое распространение.

Однако по мере накопления экспериментальных данных появились некоторые сомнения в правильности интерпретации результатов [24]. Так, в [4] исследования фотостимулированной экзопланарной эмиссии в германии свидетельствуют о наличии только двух зарядовых состояний свободной вакансии при смещении уровня Ферми практически через всю запрещенную зону. Далее, в работе [56] приведены результаты изучения самодиффузии в германии (в зависимости от температуры, концентраций донорной и акцепторной примесей, гидростатического давления), которое также свидетельствует о наличии у свободной вакансии двух зарядовых состояний — V^0 и V^- . Авторы [4, 56] сходятся в том, что акцепторный уровень изолированной вакансии расположен в нижней половине запрещенной зоны, но не слишком близко к краю валентной зоны; исследование процессов дефектообразования в сверхчистом p -Ge при низкотемпературном γ -облучении [20] позволяет указать возможное положение соответствующего акцепторного состояния: $\approx E_p + 0.2$ эВ. По-видимому, энергетические уровни, лежащие вблизи края зоны проводимости в облученном n -Ge (см. далее), принадлежат «возмущенным» вакансиям, связанным в ПФ; тогда смещение акцепторных состояний таких вакансий составляет несколько десятых эВ.

Экспериментальные данные, полученные при исследовании процессов низкотемпературного дефектообразования в германии, свидетельствуют о том, что собственный межузельный атом может находиться по крайней мере в двух зарядовых состояниях (I^0, I^+); это в свою очередь обеспечивает возможность ионизационно-стимулированной миграции при последовательных перезарядках в неравновесных условиях облучения и отжига [8-11]. Особенности процессов взаимодействия акцепторов III группы с собственными дефектами в p -Ge, а также разнообразие ионизационно-стимулированных процессов отжига ПФ в n -Ge приводят к мысли о необычных свойствах межузельных атомов в этом материале: их термическая ионизация практически не реализуется при $T < 300$ К, так как соответствующие энергетические состояния находятся глубоко в запрещенной зоне, а ионизация при захвате дырки в p -Ge затруднена из-за очень малого сечения захвата (по-видимому, $\sigma_p \ll 10^{-19}$ см²). Проявление соответствующего донорного состояния возможно либо при фотоионизации с подходящей энергией квантов, либо при захвате дырки, если межузельный атом расположен вблизи отрицательно заряженного центра, например V^- , генетически связанной с ним в близкую ПФ.

Как уже упоминалось, энергии миграции V и I оказались очень низкими по сравнению с их первоначальными оценками, сделанными на основе опытов по исследованию высокотемпературной самодиффузии (табл. 1, а также [57]). Причины этого расхождения до сих пор окончательно не выяснены.

Вакансия в германии, как и в кремнии, более подвижна в материале n -типа. Однако по сравнению с кремнием энергия миграции вакансии в германии выше в материале обоих типов проводимости. Заметим, что при обсуждении этих вопросов обычно цитируется работа [58], согласно которой для германия $E_v \leq 0.2$ эВ. Это заключение было сделано на основании исследования полос ИК поглощения 620 и 719 см⁻¹, последняя проявляется в процессе отжига облученного германия при $T \approx 90$ К и приписана «возбужденной» конфигурации А-центра (полоса 620 см⁻¹ идентифицирована как принадлежащая А-центру). Считалось, что при указанной температуре вакансии становится подвижной. Однако принадлежность полос 620 и 710 см⁻¹ одному перестраивающемуся центру в дальнейшем не подтвердилась [59]. Кроме того, при «нормальной» величине предэкспоненциального множителя в коэффициенте диффузии энергия активации диффузии V^- , указанная в табл. 1, достаточно, чтобы при $T \approx 140$ К длина диффузионного смещения вакансии была ≤ 50 Å. Тогда эффективное образование А-центров может происходить при $T < 140$ К, как это и наблюдалось в [58]. Малая доля вакансий, находящихся на существенно мень-

шем от атомов кислорода расстояния, способна образовать А-центры и при более низкой температуре.

Из табл. 1 видно, что $E_V^{\text{н}}$ и $E_I^{\text{н}}$ сильно зависят от зарядовых состояний V и I, т. е. миграция компонентов ПФ управляется положением уровня Ферми, а в условиях облучения или при инъекции носителей заряда скорость миграции зависит от скорости перезарядок V и I. Как уже упоминалось, если стабильность каждой из межузельных конфигураций зависит от зарядового состояния I, движение межузельного атома может быть практически атермическим в условиях возбуждения электронной подсистемы [8-11]. Это условие необходимо для объяснения экспериментальных результатов, полученных при низкотемпературном облучении как кремния, так и германия.

2.2 Аннигиляция и разделение компонентов ПФ при различных температурах облучения. Далее рассматриваются процессы, определяющие поведение V и I после момента генерации ПФ. Приводимые рассуждения позволяют качественно объяснить данные о сечениях образования экспериментально наблюдаемых дефектов, в частности, в облученном германии (рис. 1, табл. 2).

Согласно данным работ [6, 24], подавляющее большинство ПФ, генерированных при 4.2 К (80-90 % при облучении электронами ~1 МэВ) аннигилирует на стадии отжига 65 К. Эта модель была модифицирована в последующих работах [7].

Достижения в области идентификации точечных дефектов в кремнии, которые оказались возможными благодаря использованию ЭПР [2, 3], позволили прийти к заключению, что собственные межузельные атомы подвижны в условиях облучения при $T \leq 10$ К. В последующие годы это обстоятельство принималось во внимание также при разработке концепции поведения ПФ в германии при низкотемпературном облучении.

Альтернативная модель была предложена в [60-62], авторы этих работ считают, что все ПФ в германии разделяются при любой температуре. Подвижные собственные межузельные атомы при $T < 10$ К могут быть захвачены, например, донорами V группы [60, 61], с образованием слабо связанных комплексов. Последние распадаются при нагревании до 65 К, и освободившиеся межузельные атомы аннигилируют с неподвижными вакансиями. Именно этому процессу, согласно модельным представлениям [60, 61], соответствует хорошо известная стадия отжига при 65 К.

Таким образом, две полностью противоположные по смыслу модели поведения ПФ в n-Ge оказались основанными на одних и тех же экспериментальных данных, которые могут быть кратко просуммированы следующим образом.

1. Под действием электронного облучения при $T < 10$ К в n-Ge вводятся дефекты акцепторного типа. Исследования с использованием горячих электронов показали, что вводимые дефекты могут быть идентифицированы как двойные акцепторы, которые в свою очередь сопоставляются замороженным вакансиям.

2. После облучения электронами с энергией ~1 МэВ около 90 % созданных ПФ отжигаются на стадии 65 К.

3. Экспериментально определенное сечение образования дефектов в n-Ge при облучении электронами ~1 МэВ при $T < 10$ К достаточно хорошо совпадает с расчетным в предположении, что пороговая энергия смещения составляет $E_d = 30$ эВ.

4. Отжиг на стадии 65 К сопровождается выделением энергии, по оценкам приблизительно равной энергии образования ПФ [63].

5. Отжиг дефектов ускоряется в присутствии внешнего возбуждения электронной подсистемы, стадия отжига может быть смещена до 4.2 К.

Сравнительный анализ данных, полученных при низкотемпературном облучении n-Ge γ -лучами ^{60}Co и электронами с энергией 1 МэВ, позволяет нам сделать выбор в пользу модели метастабильных ПФ.

Действительно, спектр энергетических состояний и стабильность ПФ

в n -Ge после облучения при 4.2 К должны зависеть от вида облучения, поскольку различно среднее пространственное разделение между V и I в парах, созданных под действием облучений различных типов. Напротив, если все пары в ходе облучения разделяются, подвижные межузельные атомы «забывают» о своем происхождении, и дефекты, созданные электронами с энергией 1 МэВ, не должны отличаться от дефектов, созданных γ -лучами ^{60}Co (средняя энергия комптон-электронов 660 кэВ).

Экспериментальные результаты свидетельствуют о том, что низкотемпературные дефекты в n -Ge «помнят» о своем происхождении: различие в среднем пространственном разделении между V и I оказывают влияние на параметры ПФ. Так, энергия ионизации дефектов лежит в пределах $E_c - 28 < E_{\text{ион}} < E_c - 48$ мэВ после γ -облучения [47] и $E_c - 50 < E_{\text{ион}} < E_c - 70$ мэВ после облучения электронами с энергией 1.5 МэВ [7]. Центр стадии отжига дефектов, созданных с помощью γ -облучения ^{60}Co при 4.2 К, существенно смещен в сторону низких температур по сравнению с центром стадии отжига в n -Ge после низкотемпературного электронного облучения.

Из всего сказанного следует, что наблюдаемые в описанных условиях дефекты действительно представляют собой пары Френкеля, и, по-видимому, германий является единственным полупроводником в ряду алмаз—кремний—германий, в котором метастабильные ПФ могут быть заморожены и экспериментально исследованы.

Пары Френкеля в n -Ge могут быть отождествлены посредством радиационно-ускоренной миграции I к «своей» вакансии в ходе низкотемпературного облучения. Миграция, скорее всего, происходит с помощью диффузионно-дрейфового механизма [8]. При этом доля аннигилирующих ПФ определяется энергией облучения и интенсивностью радиационно-стимулированного отжига. В случае облучения n -Ge электронами с энергией 1 МэВ при $T < 10$ К почти все созданные ПФ (особенно на начальных этапах облучения) сохраняются (рис. 1), в то время как после γ -облучения при той же температуре регистрируется $\sim 10\%$ ПФ. При повышении температуры становится эффективной «обычная» активационная миграция I ; в условиях облучения при 77 К практически все ПФ аннигилируют в процессе облучения как электронами, так и γ -лучами, и сечение образования вторичных дефектов крайне мало (рис. 1).

Обсудим ситуацию более детально. На рис. 2 приведены расчетные зависимости упругой $U^{\text{уп}}$ (кривые 1—4) и кулоновской $U^{\text{кул}}$ (кривые 5 и 6) энергий взаимодействия между V и I от их пространственного разделения r (при расчете кривых 1—4 учитывался и поляризационный вклад в энергию взаимодействия). Штриховые линии 7 и 8 соответствуют значениям kT при 77 и 300 К. Точки пересечения кривых со штриховыми прямыми указывают те расстояния $\tilde{r}'_a = r^{\text{уп}}$ и $\tilde{r}''_a = r^{\text{кул}}$, при которых $|U| = kT$. Кажется очевидным, что ПФ будут аннигилировать, если $r < \tilde{r}'_a$ или $r < \tilde{r}''_a$, в противном случае они разделяются (но только тогда, когда хотя бы один из компонентов подвижен!). Как указано выше, это справедливо только для кулоновского взаимодействия (без экранирования), однако из общих физических соображений этот критерий может быть использован и для другого типа взаимодействия при оценке вероятности диссоциации пары Френкеля.

После разделения ПФ ее компоненты могут образовывать комплексы с другими дефектами или примесными атомами, а также аннигилировать с гетерогенными (возникшими в другом узле решетки) V и I .

Очевидно, что радиус аннигиляции очень чувствителен к заряду V и I , судьба ПФ зависит решающим образом от этих зарядов и от скорости перезарядки в условиях облучения. Обсудим этот вопрос подробнее.

Мы полагаем, что V и I в момент рождения ПФ нейтральны [64]. Если пространственное разделение между V и I сразу после образования ПФ $r > r_4^{\text{уп}} \approx \approx 2\mathcal{L}$ (где \mathcal{L} — постоянная решетки; нижний индекс r — номер кривой рис. 2),

пара диссоциирует. Однако судьба пары $[V^0I^0]$ с $r > \bar{r}_{4np}^+$ может драматически измениться, если знак заряда одного из компонентов изменится в процессе диссоциации. Поскольку коэффициент диффузии межузельного атома D_I существенно больше, чем коэффициент диффузии вакансии D_V , можно говорить о миграции I в присутствии практически неподвижной вакансии. Судьба пары V^0I^0 зависит от скорости перезарядки. Например, I^0 , находящийся на расстоянии $\bar{r}_{4np}^+ < r < \bar{r}_{2np}^+ \approx 4\mathcal{L}$ от вакансии, проаннигилирует с ней, в случае, если она захватит электрон. Если же и I^0 захватит дырку, то аннигиляция пары $[V-I^+]$ произойдет даже на расстоянии $\bar{r}_{3np}^+ < r < \bar{r}_{5np}^+ \approx 7\mathcal{L}$. Как следствие, можно ожидать сложной температурной зависимости вероятности диссоциации ПФ (W). Эта зависимость определяется температурной зависимостью D_I (включая изменение заполнения донорного состояния I , поскольку D_I^0 и D_I^+ различны), а также температурными зависимостями всех параметров, которые контролируют перезарядки V и I .

Вероятность W зависит также от энергии бомбардирующих частиц и от интенсивности облучения. Первый фактор определяет распределение ПФ по расстояниям между V и I , а также потери энергии быстрых электронов. Вторым фактором определяет характерное время перезарядки обоих компонентов через концентрации избыточных носителей заряда Δn и Δp .

Экспериментальные результаты свидетельствуют о том, что под действием электронного и γ -облучения при 77 К в n - и p -Ge ПФ почти полностью аннигилируют (рис. 1), в то время как в условиях облучения при 300 К ситуация противоположная — практически все пары разделяются. На первый взгляд, это необъяснимо, однако дальнейший анализ рис. 2 показывает, что радиусы аннигиляции \bar{r}_{4np}^+ и \bar{r}_{2np}^+ уменьшаются с ростом температуры, одновременно сильно растут D_I . В результате при облучении n -Ge при комнатной температуре I^0 имеет достаточно времени до перезарядки $V^0 \rightarrow V^-$, чтобы уйти от V^0 на расстояние $r > \bar{r}_{3np}^+$; в результате пара $[V^0I^0]$ диссоциирует. Напротив, при 77 К вакансия захватывает электрон до того, как I^0 уйдет на расстояние $r > \bar{r}_{4np}^+$, и диссоциации не происходит.

Таким образом, предлагаемая модель качественно объясняет экспериментальные данные рис. 1 о сечениях образования дефектов в условиях облучения как электронами, так и γ -лучами ^{60}Co при 4.2, 77 и 300 К в германии n -типа, а также в p -Ge при 77 и 300 К. Здесь мы не обсуждаем поведение ПФ в более сложных ситуациях, например при n - p -конверсии типа проводимости в условиях низкотемпературного облучения (см. [65, 66]).

Вопрос о величине сечения образования экспериментально наблюдаемых дефектов в p -Ge в условиях облучения при $T < 10$ К требует дополнительного обсуждения. Дело в том, что, как видно из рис. 1 и табл. 2, при этих температурах облучения сечение образования дефектов в p -Ge существенно ниже, чем в n -Ge.

При анализе ситуации прежде всего нужно учесть, что исследования электрических параметров не позволяют в этом случае обнаружить глубокие акцепторные состояния вакансий,³ по-видимому, можно будет лишь заметить энергетические состояния I или метастабильной ПФ. Энергетические состояния, предположительно приписываемые близкой ПФ, действительно были обнаружены после γ -облучения при 4.2 К, это уровни E_v (0.02 ÷ 0.04) эВ, стабильные до 35—45 К. Сечение их образования, однако, очень мало.

Проанализируем возможные причины различия сечений образования ПФ в германии двух типов проводимости при $T \leq 10$ К. Отметим, что в цитированных экспериментах при электронном облучении реализовался низкий (или

³ В табл. 2, кроме того, приведены значения сечений образования дефектов акцепторного типа, которые образуются в указанных условиях, однако стабильны до более высоких температур (≥ 150 К) и предположительно идентифицируются как дивакансии.

промежуточный) уровень возбуждения электронной подсистемы ($\Delta n \ll n_0$, $\Delta p \ll p_0$) и, вообще говоря, можно ожидать, что вследствие различия зарядовых состояний V и I соотношение вероятностей разделения и аннигиляции компонентов ПФ в n - и p -Ge будет различным. Действительно, как видно из рис. 1, радиус аннигиляции для V^0 и I^+ (т. е. в p -Ge) меньше, чем для V^- и I^0 (в n -Ge).

Остается предположить, что малое сечение образования экспериментально наблюдаемых дефектов в p -Ge обусловлено тем, что практически все межузельные атомы уходят от вакансий во время облучения и захватываются на стоки (или образуют скопления), теряя при этом свою электрическую активность. Вакансии же не проявляются при электрических измерениях.

В опытах по γ -облучению уровень возбуждения электронной подсистемы был высоким, и указанная причина различия сечений дефектообразования не должна была играть роль. Причина различия сечений в n - и p -Ge в условиях облучения при $T < 10$ К при высоком уровне возбуждения (в том числе и при электронном облучении, например в [67]) остается неясной.

В противоположность германию, в кремнии не удается обнаружить никаких экспериментальных проявлений метастабильных ПФ, удается наблюдать только изолированные вакансии. Собственные межузельные атомы не проявились ни в одном эксперименте. Сечение образования экспериментально наблюдаемых дефектов при криогенных температурах очень мало, оно составляет несколько процентов от расчетного даже в том случае, когда принято для расчета значение пороговой энергии образования ПФ $E_d = 40$ эВ. Это заставляет считать, что подавляющее большинство пар Френкеля аннигилирует в процессе облучения. Два фактора, по-видимому, ответственные за ионизационно-стимулированную аннигиляцию компонентов ПФ при низкотемпературном облучении кремния — высокий уровень возбуждения и существование энергетических барьеров для взаимодействия I с электрически неактивными примесями (кислородом, углеродом и др.), хотя при повышении температуры облучения эти примеси становятся весьма эффективными центрами захвата собственных межузельных атомов. Первый фактор обуславливает интенсивную перезарядку межузельных атомов ($I^0 \leftrightarrow I^+ \leftrightarrow I^{++}$), которая в свою очередь приводит к эффективной атермической миграции I и аннигиляции ПФ. Второй фактор препятствует взаимодействию с примесями и повышает эффективность аннигиляции гетерогенных V и I .

2.3. Судьба компонентов ПФ после их разделения. Из всего сказанного выше следует, что судьба изолированных V и I после диссоциации определяется их подвижностями и способностью вступать в различные квазихимические реакции с примесными атомами и другими дефектами. Рассматривая n -Ge в качестве примера, обсудим некоторые аспекты количественного описания процесса формирования вторичных дефектов при комнатной температуре.

В «бескислородном» n -Ge атомы примесей V группы активно взаимодействуют с собственными дефектами (наиболее вероятно, вакансиями) и образуют при этом электрически неактивные комплексы вакансия—донор V группы [$V-D^+$], экспериментально при этом наблюдается уменьшение концентрации мелких донорных состояний примесных атомов, такой эффект наблюдался как при электронном, так и при γ -облучении [23, 27]. Сечение этого процесса растет с ростом исходной концентрации доноров V группы до определенного предела. Максимальное сечение процесса уменьшения концентрации мелких донорных состояний атомов V группы хорошо совпадает, как это видно из диаграммы рис. 1, с расчетным сечением процесса генерации ПФ, в предположении, что пороговая энергия составляет $E_d = 30$ эВ; это соответствие достигается как в случае электронного, так и γ -облучения, хотя методика расчета $\sigma_{\text{расч}}$ в этих двух случаях различна.

Максимальное сечение соответствует ситуации, когда практически все генерированные вакансии участвуют в процессе взаимодействия с донорами

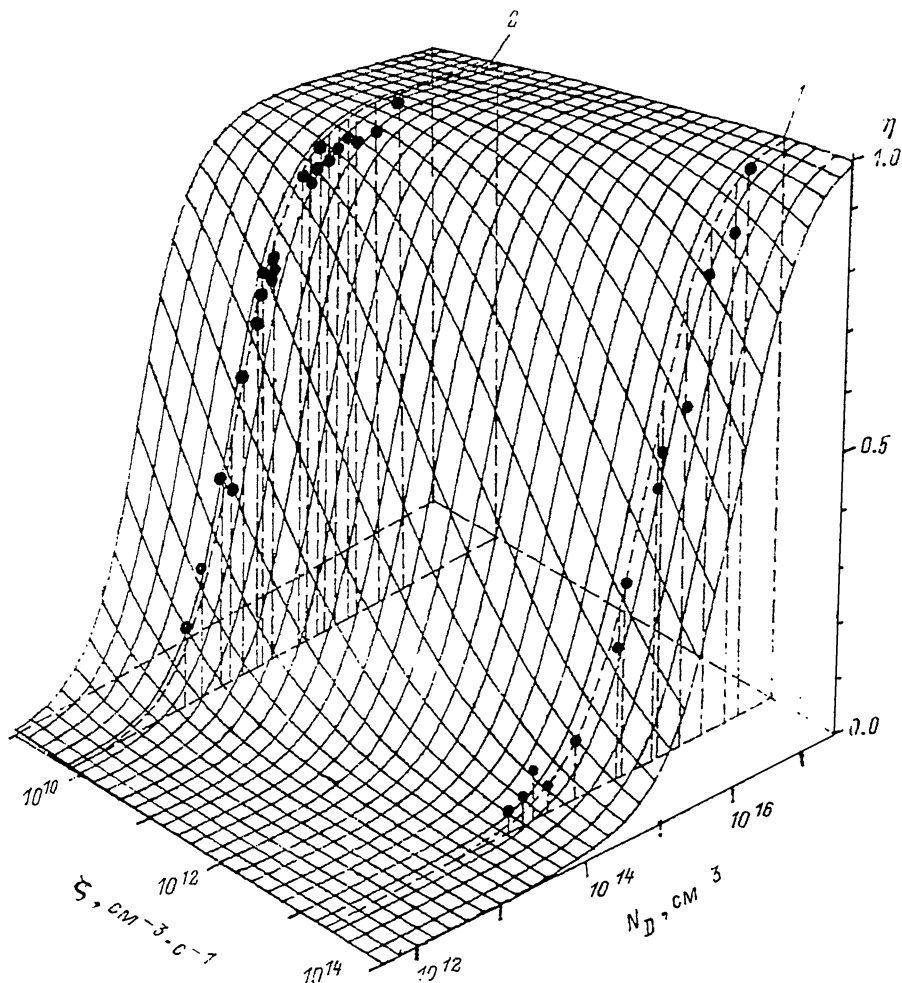


Рис. 7. Расчетная зависимость относительной скорости уменьшения концентрации мелких донорных состояний атомов V группы (η) в условиях облучения *n*-Ge при комнатной температуре от скорости генерации ПФ (ζ) и исходной концентрации доноров V группы (N_D).

Точки — эксперимент, кривые — расчет. 1 — облучение электронами с энергией 0.9 МэВ, интенсивность облучения $\gamma = 2.2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$, $\zeta = 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$, расчетное сечение образования ПФ $\sigma_{\text{ПФ}} = 1.8 \cdot 10^{-23} \text{ см}^2$; 2 — γ -облучение ^{60}Co , $\gamma = 3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$, $\zeta = 7 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$, $\sigma_{\text{ПФ}} = 5 \cdot 10^{-26} \text{ см}^2$.

$$\eta = \frac{1}{\zeta} \left| \frac{dN_D}{dt} \right|.$$

V группы. При меньших значениях N_D вакансии участвуют в двух конкурирующих процессах: а) захватываются донорами V группы, б) аннигилируют с гетерогенными межузельными атомами (вследствие большой подвижности последних скорость второго процесса может быть сравнимой со скоростью первого, несмотря на то что обычно $N_I \ll N_D$). Измеряя зависимость скорости $\left(-\frac{dN_D}{dt}\right)$ от N_D можно оценить время жизни свободной вакансии в условиях облучения τ_v , и его зависимость от концентрации примесных атомов [68]. В рамках предложенной модели оказалось возможным построение номограммы, описывающей зависимость скорости формирования комплексов вакансии—донор от концентрации доноров и от скорости генерации ПФ (т. е. от

интенсивности облучения). Номограмма показана на рис. 7, она была получена путем решения и анализа системы кинетических уравнений [69].

Хорошее совпадение расчета и эксперимента при одном и том же наборе параметров для двух сильно различающихся скоростей генерации ПФ (при электронном и γ -облучении) указывает, с одной стороны, на правильность предлагаемой системы представлений о процессах аннигиляции и разделения ПФ и судьбе разделившихся компонентов, а с другой — еще раз подтверждает правильность значения $E_a=30$ эВ для германия.

Можно, таким образом, утверждать, что в кремнии близкие ПФ нестабильны при любой температуре облучения, а германий представляет собой уникальную возможность заморозить и исследовать метастабильные пары Френкеля в полупроводнике IV группы с ковалентным характером связи; именно такого типа кристаллы являются пробным камнем при теоретическом исследовании собственных точечных дефектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М., 1967. 460 с.
- [2] Watkins G. D. // *Effects des Rayonnements sur les Semiconducteurs*. Paris, 1965. P. 97—111.
- [3] Watkins G. D., Troxell J. R., Chatterjee A. P. // *Defects and Radiation Effects in Semiconductors*. 1978. Conf. Ser. N 46. Bristol—London, 1979. P. 16—30.
- [4] Ершов С. Н. / Автореф. канд. дис. Горький, 1978.
- [5] Ершов С. Н., Пантелеев В. А., Нагорных С. Н., Черняховский В. В. // ФТТ. 1977. Т. 19. В. 1. С. 322—323.
- [6] MacKay J. W., Klontz E. E. // *Radiation Effects in Semiconductors*. London—N. Y.—Paris, 1971. P. 41—50.
- [7] Bourgoin J., Mollet F. // *Phys. St. Sol. (b)*. 1971. V. 43. P. 343—354.
- [8] Bourgoin J., Corbett J. W. // *Phys. Lett.* 1972. V. 38A. P. 135—137.
- [9] Герасимов А. Б., Церцвадзе А. А. // ФТП. 1979. Т. 13. В. 2. С. 350—352.
- [10] Bar-Yam Y., Joannopoulos J. D. // *Phys. Rev.* 1984. V. B30. P. 2216.
- [11] Car R., Kelly P. J., Oshiyama A., Pantelides S. T. // *Phys. Rev. Lett.* 1984. V. 52. P. 1814.
- [12] Troxell J. R., Chatterjee A. P., Watkins G. D., Kimerling L. C. // *Phys. Rev. B*. 1979. V. 19. N 10. P. 5336—5348.
- [13] MacKinley W. A., Feshbach H. // *Phys. Rev.* 1948. V. 74. N 12. P. 1759—1763.
- [14] Витовский Н. А., Мустафакулов Д., Чекмарева А. П. // ФТП. 1977. Т. 11. В. 9. С. 1747—1753.
- [15] Seitz F. // *Disc. Farad. Soc.* 1949. V. 5. P. 271—282.
- [16] Берман Л. С., Витовский Н. А., Ломасов В. Н., Ткаченко В. Н. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 10. С. 1816—1822.
- [17] Sonder E., Templeton L. C. // *Bull. Am. Phys. Soc.* 1958. V. 3. P. 375—376.
- [18] Коноваленко Б. М., Рывкин С. М., Ярошецкий И. Д., Богомазов Л. П. // *Атомная энергия*. 1960. Т. 9. С. 408—410.
- [19] Емцев В. В., Машовец Т. В., Назарян Е. X. // ФТП. 1979. Т. 13. В. 1. С. 124—129.
- [20] Емцев В. В., Машовец Т. В., Полоскин Д. С. // ФТП. 1991. Т. 25. В. 2. С. 191—196.
- [21] Достходжаев Т. Н., Емцев В. В., Корчажкина Р. Л., Машовец Т. В. // ФТП. 1977. Т. 11. В. 11. С. 2128—2134.
- [22] Белобородко Б. А., Васильева Е. Д., Емцев В. В., Машовец Т. В., Тропн Э. А. // ФТП. 1982. Т. 16. В. 11. С. 2041—2042.
- [23] Емцев В. В., Машовец Т. В. // *Письма ЖЭТФ*. 1971. Т. 13. В. 6. С. 675—679.
- [24] Callcott T. A., MacKay J. W. // *Phys. Rev.* 1967. V. 161. N 3. P. 698—710.
- [25] Matula R. A., Klontz E. E. // *Radiation Effects in Semiconductors*. London—N. Y.—Paris, 1971. P. 55—58.
- [26] Shimotomai M., Hasiguti R. R. // *Radiation Effects in Semiconductors*. London—N. Y.—Paris, 1971. P. 87—89.
- [27] Абдусаттаров А. Г., Емцев В. В., Машовец Т. В. // *Письма ЖТФ*. 1986. Т. 12. В. 23. С. 1461—1463.
- [28] Klontz E. E., MacKay J. W., Flanagan T. M. // *Effects des Rayonnements sur les Semiconducteurs*. Paris, 1964. P. 41.
- [29] Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки. М., 1972. 280 с.
- [30] Машкевич В. С., Толпыго К. Б. // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. В. 3. С. 520—525.
- [31] Толпыго К. Б. // ФТТ. 1962. Т. 4. В. 7. С. 1765—1777.
- [32] Коган Ш. М. // ФТТ. 1963. Т. 5. В. 10. С. 2829—2831.
- [33] Инденбом В. Л., Логинов Е. Б., Осипов М. А. // *Кристаллография*. 1981. Т. 26. В. 6. С. 1157—1162.

- [34] Таганцев А. К. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. В. 6. С. 2108—2122.
- [35] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М., 1982. 624 с.
- [36] Лившиц Е. М., Розенцвейг Л. Н. // ЖЭТФ. 1947. Т. 17. В. 9. С. 783—791.
- [37] Артемьев В. А., Михнович В. В. // Ст. деп. в ЦНИИ «Электроника», М., 1987. № Р-4630.
- [38] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М., 1987. 246 с.
- [39] Акустические кристаллы / Под ред. М. П. Шаскольской. М., 1982. 632 с.
- [40] Вицецкий В. Л., Ясковец И. И. // ФТТ. 1972. Т. 14. В. 10. С. 3046—3052.
- [41] Simpson H. M., Chaplin R. L. // Phys. Rev. 1969. V. 178. N 3. P. 1166—1170.
- [42] Hyatt W. D., Koehler J. S. // Phys. Rev. B. 1971. V. 4. N 6. P. 1903—1910.
- [43] Семенюк А. К., Назарчук П. Ф. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 7. С. 1331—1333.
- [44] Лебедев А. А., Султанов Н. А. // Препринт ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР. Л., 1986. № 1080.
- [45] Семенюк А. К., Панкевич З. В., Федосов А. В., Доскоч В. П. // Радиационные дефекты в полупроводниках. Минск, 1972. С. 134—135.
- [46] Кожевников В. Р., Михнович В. В. // ЖТФ. 1981. Т. 15. В. 1. С. 1598—1600.
- [47] Дабагян А. В., Емцев В. В. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 4. С. 747—750.
- [48] Емцев В. В., Дабагян А. В., Витовский Н. А., Машовец Т. В. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 5. С. 924—926.
- [49] Watkins G. D. // Deep Levels in Semiconductors. London—N. Y.—Tokyo—Toronto, 1986. P. 147.
- [50] Baraff G. A., Kane E. D., Schluter M. // Phys. Rev. V. B21. 1980. P. 5662—5682.
- [51] Емцев В. В., Машовец Т. В., Дабагян А. В. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 10. С. 1888—1892.
- [52] Gubskaya V. I., Kuchinskii P. V., Lomako V. M. // Phys. St. Sol. (a). 1984. V. 85. N 2. P. 585—590.
- [53] Emtsev V. V., Mashovets T. V., Mikhnovich V. V., Vitovskii N. A. // Radiation Effects and Defects in Solids. 1989. V. 111-112 (1-2). P. 99—118.
- [54] Дабагян А. В. // Автореф. канд. дис. Л., 1988.
- [55] Stein H. J. // Radiation Effects in Semiconductors. London—N. Y.—Paris, 1971. P. 125—139.
- [56] Werner M., Mehrer. / Proc. XIII Int. Conf. on Defects in Semiconductors (The Metallurgical Society of AIME). Warrendale, Penn., USA. 1985. P. 301—307.
- [57] Mayer H. J., Mehrer H., Maier K. // Radiation Effects in Semiconductors. Bristol—London, 1977. P. 186—193.
- [58] Whan R. E. // Phys. Rev. 1965. V. 140. N 2A. P. 690—698.
- [59] Whan R. E. // Radiation Effects in Semiconductors. N. Y., 1968. P. 195—203.
- [60] Meese J. M., MacKay J. W. // Radiation Effects in Semiconductors. London—N. Y.—Paris, 1971. P. 51—54.
- [61] Meese J. M. // Phys. Rev. 1974. V. B9. N 10. P. 4373—4391.
- [62] Смирнов Л. С. и др. // Физические процессы в облученных полупроводниках. Новосибирск, 1977. С. 66.
- [63] Singh M. P., MacKay. // Phys. Rev. 1968. V. 175. N 3. P. 985—990.
- [64] Емцев В. В., Витовский Н. А., Машовец Т. В. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 1. С. 145—149.
- [65] Герасимов А. Б., Долидзе Н. Д., Кахидзе Н. Г., Кововаленко Б. М., Челидзе Н. В. // Радиационная физика кристаллов и p - n -переходов. Минск, 1972. С. 55—67.
- [66] Крайчинский А. Н. // Автореф. канд. дис. Киев, 1975.
- [67] Bourgoin J. C., Mooney P. M., Poulin F. // Defects and Radiation Effects in Semiconductors, 1980. Bristol—London, 1981. P. 33—43.
- [68] Витовский Н. А., Абдусаттаров А. Г., Емцев В. В., Машовец Т. В., Полоскин Д. С. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 10. С. 1826—1831.
- [69] Витовский Н. А., Емцев В. В., Машовец Т. В., Полоскин Д. С. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 8. С. 1483—1486.