

$[\text{CSi}_4\text{H}_{12}] \Delta V_C = 25.9$, кластера $[\text{SnSi}_4\text{H}_{12}] \Delta V_{\text{Sn}} = 62.8 \text{ \AA}^3$. Отсюда найдено изменение объема кристалла при введении одного дефекта $\Delta V = \Delta V_C, \text{Sn} - \Delta V_{\text{Si}}$. При этом полученные величины находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными (см. таблицу).

Более правильно в расчете учитывать и следующие координационные сферы. Поэтому в дальнейшем были рассчитаны кластеры $[\text{SiSi}_4\text{Si}_{12}\text{H}_{36}]$, $[\text{Si}(\text{O})_4\text{Si}_4\text{Si}_{12}\text{H}_{36}]$ и $[\text{C}(\text{O})_4\text{Si}_4\text{Si}_{12}\text{H}_{36}]$. Изменение объема при введении дефекта для сферически симметричных дефектов SiO_4 и CO_4 находилось аналогично предыдущему рассмотрению как разность объемов первых координационных сфер кластеров с дефектом и без него. Для определения изменения объема, приходящегося на 1 атом кислорода, полученная разность объемов делилась на 4. Результаты приведены в таблице и также находятся в хорошем согласии с экспериментом. Для дефекта $\text{C}_S - \text{O}_I$ экспериментальные данные отсутствуют, и приведенное значение ΔV следует считать первой оценкой.

На основании проведенных расчетов можно заключить, что предложенная схема оценки деформационных зарядов дефектов перспективна и достаточно проста в применении. Можно использовать подход, основанный на квантово-химических расчетах кластеров промежуточных размеров (15—50 атомов), с учетом оптимизации геометрических параметров для оценки изменения объема кристалла при образовании дефектов различной сложности.

Л и т е р а т у р а

- [1] Теодосиу К. Упругие модели дефектов в кристаллах. М., 1985. 352 с.
- [2] Стоунхэм А. М. Теория дефектов в твердых телах. Т. 1. М., 1978. 569 с.
- [3] Бугай А. А., Кустов В. Е., Семенов Ю. Г., Шаховцов В. И., Шиндич В. Л. // ФТТ. 1985. Т. 27. В. 6. С. 1824—1829.
- [4] Кустов В. Е., Мильвидский М. Г., Семенов Ю. Г., Туровский Б. М., Шаховцов В. И., Шиндич В. Л. // ФТП. 1986. Т 20. В. 2. С. 270—274.
- [5] Takano Y., Maki M. // Acta Cryst. 1972. V. A28. P. 5171.
- [6] Baker J. A., Tucker T. N., Moyer N. E., Buschert R. C. // J. Appl. Phys. 1968. V. 39. N 9. P. 4365—4368.
- [7] Lee Y. T., Miyamoto N., Nishizawa J. // J. Electrochem. Soc. 1975. V. 122. N 4. P. 530—535.
- [8] Johnson E. R., Christian S. M. // Phys. Rev. 1954. V. 95. N 2. P. 560—561.
- [9] Маслов В. Г. // ЖСХ. 1977. Т. 18. В. 2. С. 414—415.
- [10] Bingham R. C., Dewar M. J. C., Lo D. M. // J. Am. Chem. 1975. V. 97. N 6. P. 1285—1293.
- [11] Dewar M. J. S., Thiel W. // Am. Chem. Soc. 1977. V. 99. N 15. P. 4899—4907.
- [12] Кустов В. Е., Критская Т. В., Трипачко Н. А., Шаховцов В. И. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 2. С. 313—315.

Получено 1.11.1988

Принято к печати 7.12.1988

ФТП, том 23, вып. 4, 1989

ОСОБЕННОСТИ НАКОПЛЕНИЯ РЕКОМБИНАЦИОННЫХ ЦЕНТРОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ *p*-Si

Казакевич Л. А., Лугаков П. Ф., Филиппов И. М.

При облучении выращенных по методу Чохральского (тигельных) монокристаллов *p*-Si наиболее эффективно образуются рекомбинационно активные радиационные дефекты (РД), вносящие в запрещенную зону донорный энергетический уровень $E_c + (0.30 - 0.38) \text{ эВ}$ (так называемые *K*-центры) [1, 2]. Представления о структуре и механизмах образования этих РД постоянно менялись [1-6], и в настоящее время наиболее распространенными являются две точки зрения, согласно которым *K*-центрами могут быть комплексы углерод-кислород-дивакансия [3, 5, 7] или междуузельный углерод-междуузельный

кислород [6, 8-10]. С целью изучения рекомбинационных свойств таких центров и выполнялась данная работа.

Для исследований были приготовлены две группы образцов с исходным удельным сопротивлением $\rho \approx 20 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ и содержанием кислорода $(7 \div 10) \cdot 10^{17}$ и углерода $(1 \div 2) \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Первую группу составляли кристаллы, выращенные методом Чохральского и подвергнутые стандартной [11] стабилизирующей термической обработке ($650 \text{ }^\circ\text{C}$ 1 ч). Стабилизирующий отжиг кристаллов второй группы после выращивания не проводился. Облучение осуществлялось γ -квантами ^{60}Co при $T_{\text{обл}} \leq 50 \text{ }^\circ\text{C}$. Методами фотомагнитоэлектрического эффекта и модуляции проводимости в точечном контакте измерялись инжекционные ($\Delta p/p_0 = 10^{-4} \div 10^0$) и температурные ($T_{\text{изм}} = 80 \div 450 \text{ K}$) зависимости времени жизни (τ) неравновесных носителей заряда (ННЗ).

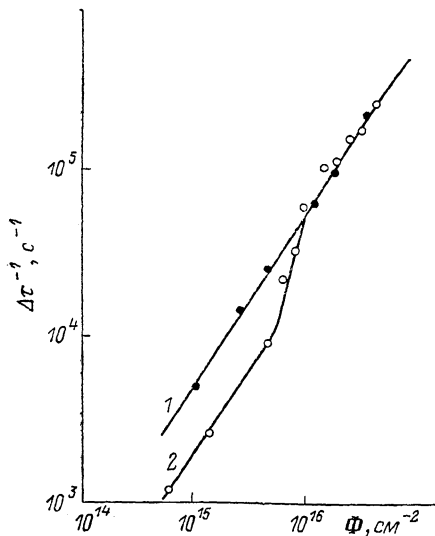


Рис. 1. Дозовые зависимости изменения времени жизни носителей заряда в кристаллах первой (1) и второй (2) групп.

$T_{\text{изм}} = 300 \text{ K}$; $\Delta p/p_0 = 5 \cdot 10^{-2}$.

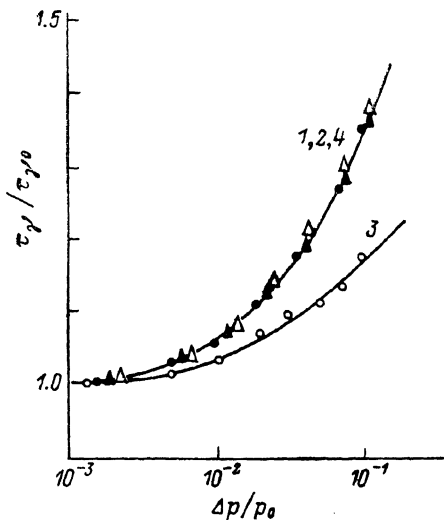


Рис. 2. Инжекционные зависимости времени жизни носителей заряда в кристаллах первой (1, 2) и второй (3, 4) групп.

$\Phi, \text{см}^{-2}$: 1, 2 — $2 \cdot 10^{15}$, 3, 4 — $2 \cdot 10^{16}$. $T_{\text{изм}} = 300 \text{ K}$.

Согласно анализу последних, во всех указанных кристаллах после облучения различными интегральными потоками Φ γ -квантов наблюдался один и тот же энергетический спектр уровней основных рекомбинационно активных РД. Как правило, рекомбинация ННЗ идет через глубокие энергетические уровни, расположенные у $E_v + (0.35 \pm 0.03) \text{ эВ}$. Вместе с тем степень радиационного изменения τ и его чувствительность к уровню инжекции ННЗ для образцов двух групп различны и зависят от Φ . Так, на рис. 1 приведены зависимости $\Delta\tau^{-1} = \tau_{\Phi}^{-1} - \tau_0^{-1}$ от потока γ -квантов (τ_0, τ_{Φ} — времена жизни носителей заряда до и после облучения интегральным потоком Φ), а на рис. 2 — инжекционные зависимости $\tau_{\Phi}/\tau_0 = f(\Delta p/p_0)$ в облученных кристаллах (τ_{Φ} — время жизни ННЗ при произвольном уровне инжекции ННЗ, а τ_0 — при $\Delta p/p_0 \rightarrow 0$). Как видно, на начальных этапах облучения ($\Phi < 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$) значения $\Delta\tau^{-1}$ в кристаллах первой и второй групп различаются в 2–3 раза, но при $\Phi > 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ они практически одинаковы. Инжекционные зависимости τ для обеих групп образцов совпадают лишь при высоких интегральных потоках γ -квантов ($\Phi > 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$), тогда как при $\Phi < 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ в образцах второй группы изменение τ с ростом $\Delta p/p_0$ более слабое. Следует отметить, что все температурные и инжекционные зависимости τ для образцов первой и второй групп удовлетворительно описываются в рамках статистики Холла—Шокли—Рида [12]. Однако в зависимости от группы кристаллов и интегрального потока γ -квантов различной оказывается асимметрия коэффициентов захвата электронов (C_n) и дырок (C_p) на уровне рекомбинационных центров (согласно данным рис. 2, при $\Phi = 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ $C_n/C_p = 5.0$ и 2.5 для образцов первой и второй групп

соответственно). Из анализа приведенных на рис. 1 дозовых зависимостей величины $\Delta\tau^{-1}$ (с учетом дополнительно сделанных холловских измерений и полученных из них результатов об эффективности введения РД с уровнем $E_r + 0.35$ эВ) при $\Phi < 5 \cdot 10^{15}$ см⁻² также получены различные значения коэффициентов захвата электронов на уровни этих РД в кристаллах первой ($C_n = 5.3 \cdot 10^{-8}$ см³/с) и второй ($C_n = 2.1 \cdot 10^{-8}$ см³/с) групп. При более высоких интегральных потоках ($\Phi > 1 \cdot 10^{16}$ см⁻²) в образцах обеих групп коэффициенты захвата электронов и дырок на уровне $E_r + 0.35$ эВ рекомбинационных центров становятся практически одинаковыми и близкими по величине к их значениям для кристаллов первой группы при $\Phi < 5 \cdot 10^{15}$ см⁻².

На основании полученных результатов представляется логичным сделать заключение о возможности образования при облучении исследуемых кристаллов двух типов РД, вносящих в запрещенную зону кремния близкие энергетические уровни, но имеющие различные рекомбинационные параметры. По нашему мнению, такими дефектами являются комплексы углерод—кислород—дывакансия (COW) и междоузельный углерод—междоузельный кислород ($C_I O_I$) [3, 5-10]. Наиболее вероятным механизмом образования комплексов COW является захват генерируемых облучением вакансий присутствующими в исходных кристаллах кремния оптически активными углерод-кислородными ассоциациями типа узловой углерод—междоузельный кислород ($C_S O_I$) [3, 5, 13], которые представляют собой заготовки для формирования комплексов COW. Помимо таких комплексов при достаточно высокой концентрации фоновых примесей (C, O) могут образовываться и комплексы $C_I O_I$ в результате вытеснения собственными междоузельными атомами атомов углерода в междоузельное положение и последующего захвата их междоузельным кислородом [6, 8-10]. Соотношение между концентрациями комплексов COW и $C_I O_I$ будет зависеть от состояния и характера распределения фоновых примесей в объеме кристалла, т. е. условий получения кремния. При наличии в кристаллах в значительных концентрациях углерод-кислородных ассоциаций $C_S O_I$ на начальных потоках облучения накапливаются комплексы COW, а по мере истощения заготовок ($C_S O_I$) и накопления междоузельного углерода с ростом Φ наиболее вероятным является образование комплексов $C_I O_I$. Такая ситуация реализуется в образцах второй группы. При этом уменьшение τ на начальных этапах облучения обусловлено рекомбинацией ННЗ на комплексах COW, а при увеличении Φ доминирующими рекомбинационными центрами становятся комплексы $C_I O_I$, которые имеют более высокие сечения захвата электронов и дырок. В кристаллах первой группы, прошедших стабилизирующую термообработку, проявляется рекомбинационная активность лишь одного типа РД — комплексов $C_I O_I$. Представляется, что это обусловлено, во-первых, уменьшением при стабилизирующем отжиге концентрации заготовок $C_S O_I$, а тем самым и эффективности образования комплексов COW; во-вторых, в процессе термообработки возрастает концентрация свободного междоузельного кислорода при отжиге термодиффектов [11], что также приводит к увеличению эффективности образования комплексов $C_I O_I$.

Таким образом, непротиворечивое, согласующееся с результатами других работ [4, 7] объяснение полученных на опыте результатов может быть дано в предположении образования при облучении выращенного методом Чохральского *p*-Si двух рекомбинационно активных углерод-кислородосодержащих комплексов COW и $C_I O_I$, концентрация которых зависит от характера распределения фоновых примесей в кристалле. Эти комплексы имеют в запрещенной зоне близкие уровни у $E_r + (0.35 \pm 0.03)$ эВ, но различающиеся коэффициенты захвата неосновных носителей заряда.

Л и т е р а т у р а

- [1] Маловецкая В. М., Галкин Г. Н., Вавилов В. С. // ФТТ. 1962. Т. 4. В. 5. С. 1372—1374.
- [2] Carter J. R. // IEEE Trans. Nucl. Sci. 1966. V. NS-13. N 6. P. 24—32.
- [3] Lee Y. H., Corbett J. W., Brower K. L. // Phys. St. Sol. (a). 1977. V. 41. N 2. P. 637—647.
- [4] Mooney P. M., Cheng L. J., Süli M., Gerson J. D., Corbett J. W. // Phys. Rev. B. 1977. V. 15. N 8. P. 3836—3843.

- [5] Лугаков П. Ф., Лукашевич Т. А., Шуша В. В. // ФТП. 1979. Т. 13. В. 2. С. 401—404.
 [6] Литвинко А. Г., Макаренко Л. Ф., Мурия Л. И., Ткачев В. Д. // ФТП. 1980. Т. 14. В. 4. С. 776—780.
 [7] Ferenczi G., Lodos C. A., Pavelka T., Somogyi M., Mertens A. // Def. Semicond. Trans. Techn. Switzerland, 1986. P. 947—951.
 [8] Thonke K., Hangleiter A., Wagner J., Sauer R. // J. Phys. C. 1986. V. 18. N 23. P. L795—L798.
 [9] Asom M. T., Benton J. L., Sauer R., Kimerling L. C. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 51. N 4. P. 256—258.
 [10] Trombetta J. M., Watkins G. D. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 51. N 14. P. 1103—1105.
 [11] Рейви К. Дефекты и примеси в полупроводниковом кремнии. М., 1984. 472 с.
 [12] Hall R. N. // Phys. Rev. 1952. V. 87. N 2. P. 387—388. Shockley W., Read W. // Phys. Rev. 1952. V. 87. N 4. P. 835—842.
 [13] Bean A. R., Newman R. C. // J. Phys. Chem. Sol. 1972. V. 33. N 2. P. 255—268.

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

Получено 9.11.1988
 Принято к печати 7.12.1988

ФТП, том 23, вып. 4, 1989

ДИСЛОКАЦИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ВОССТАНОВЛЕННОГО РУТИЛА

Девятков М. Н., Кашинцева В. Л., Овчинникова Г. И.

В последние годы активно исследуется дислокационная проводимость в классических полупроводниках, таких как германий и кремний [1, 2]. Эти исследования проводятся при низких температурах, так как при комнатной температуре преобладает собственная проводимость материалов. Можно, однако, наблюдать дислокационную проводимость при комнатной температуре, например, в диэлектриках. Среди диэлектриков можно указать материалы, в которых пластические деформации при определенных условиях образуются без приложения внешних усилий. Так, в нестехиометрических окислах TiO_{2-x} (x — степень отклонения от стехиометрии) пластические деформации появляются в результате перестройки решетки при переходе к нестехиометрической фазе [3, 4]. Наличие внешнего давления приводит к усилению кинетики этих процессов и к некоторому изменению ориентации образующихся плоскостей кристаллографического сдвига (ПКС) [3].

Монокристаллы рутила, выращенные методом Вернейля, восстанавливались путем нагрева в вакууме (парциальное давление кислорода 10^{-13} мм рт. ст.) в присутствии ниобия при температуре 1329 К в течение 2.5 ч. Условия восстановления соответствовали работе [5], где было показано, что восстановление при температурах выше 1329 К во всей области парциальных давлений кислорода вплоть до 10^{-7} мм рт. ст. приводит к устойчивой структуре дефектов, такой, что проводимость при комнатной температуре мало отличается от проводимости при температуре восстановления. Затем образцы охлаждались при комнатной температуре в течение примерно 6 ч. Условия охлаждения важны с точки зрения образования ПКС, так как последние появляются при сравнительно медленном охлаждении [6].

Пользуясь приведенными в работе [7] зависимостями x и проводимости σ от величины парциального давления P_{O_2} , мы оценили x для наших образцов в пределах от 10^{-4} до 10^{-3} . Это довольно слабая степень восстановления, но и в этом случае, согласно [8], наблюдаются как пластинчатые дефекты, так и ПКС.