

РОЗДІЛ I

Фізика твердого тіла

УДК621.315.592

Леонід Панасюк
Володимир Коломоєць
Сергій Федосов

Механізми тензоефектів у нейтронно-легованому γ -опроміненному n-Si(P) при сильних одновісних тисках

Для визначення енергії активації високотемпературних термодонорів технологічного походження та впливу сильних одновісних тисків на положення енергетичних станів дефектів у нейтронно-легованому γ -опроміненному n-Si(P) досліджено ефект Холла, тензо-холл-ефект, тензорезистивний ефект. На основі отриманих даних зіставлено головні характеристики й параметри нейтронно-легованого n-Si(P) та кремнію, легovanого фосфором під час вирощування.

Ключові слова: енергія активації, технологічні термодонори, трансмутаційно-легований, ефект Холла, тензоефект.

Постановка наукової проблеми та її значення. Технологія нейтронного легування вимагає проведення високотемпературного відпалу за температури $T = (800 \div 850)^\circ\text{C}$ упродовж 2 год для усунення радіаційних пошкоджень кристалічної ґратки, які виникають унаслідок опромінення частинками високих енергій у ядерному реакторі.

Однак при відпалі просліджуємо не лише зменшення кількості дефектів, зумовлених безпосередньо опроміненням нейтронами, а й утворення нових дефектів. Оскільки кристали кремнію, які вирощують і методом безтигельної зонної плавки (БЗП), і методом Чохральського, мають значний уміст кисню (від $\approx 5 \times 10^{15}$ до $1,8 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [1]), технологічний відпал приводить до формування так званих високотемпературних термодонорів-II (ТД-II) [1; 7; 8], пов'язаних із наявністю кисню в кристалах кремнію.

Результати дослідження особливостей тензорезистивних (ТР) ефектів у нейтронно-легованих (НЛ) кристалах кремнію з різною концентрацією домішки фосфору ($N_p = 10^{14} \div 10^{15} \text{ см}^{-3}$) [3; 5] дали підставу визначити наявність у забороненій зоні енергетичних станів. Ці стани зумовлені наявністю в об'ємі кристалів ТД-II, які виникають під час високотемпературного технологічного відпалу зливків після опромінення повільними нейтронами. Дані аналізу температурних залежностей опору, тензоопору й тензо-холл-ефекту підтвердили те, що в кристалах кремнію зі значним умістом кисню високотемпературний технологічний відпал приводить до появи термодонорів з енергіями активації $\varepsilon_a \approx (60 \div 100) \text{ меВ}$.

Незначні зміни концентрації вільних електронів із підвищенням температури в досліджуваних кристалах [3; 5] не давали змоги визначити з потрібною точністю енергію активації термодонорів технологічного походження в кристалах. Крім того, для n-Si з концентрацією домішки фосфору $N_p \geq 10^{14} \text{ см}^{-3}$ спостерігали перебиття експоненціальних ділянок зміни концентрації електронів за рахунок активації домішки фосфору та ТД-II.

Мета й завдання статті. Оскільки вплив термодонорів на властивості НЛ кремнію, як показали дослідження, збільшується зі зменшенням концентрації легуючої домішки фосфору, то **мета** даної статті – дослідження електрофізичних властивостей високоомних кристалів нейтронно-легованого n-Si(P) із концентрацією фосфору $N_p < 10^{13} \text{ см}^{-3}$, а **завдання** – визначити енергію активації ТД-II

технологічного походження, а також установити механізми тензорезистивних ефектів у сильно деформованих кристалах НЛ γ -опроміненого кремнію.

Виклад основного матеріалу й обґрунтування отриманих результатів дослідження. Для встановлення механізмів тензоефектів, які визначають особливості відповідних залежностей електрофізичних властивостей від одновісного тиску та їх зв'язку з типом дефектів кристалічної ґратки, досліджено поздовжній тензорезистивний і тензо-холл-ефект у сильно деформованих нейтронно-легованих γ -опроміненних кристалах кремнію в температурному діапазоні $T = (78 \div 300)$ К при одновісних тисках до $X = (1,5 \div 1,8)$ ГПа і дозах опромінення Φ до $2,1 \times 10^{17}$ квант/см².

На рис. 1 представлено залежності питомого опору від тиску $\rho_x / \rho_0 = f(X)$ для вимірів поздовжнього ТР ефекту в кристалах кремнію, легованих фосфором із розплаву, та нейтронно-легованому кремнію. Тензорезистивний ефект для n-Si, легованого фосфором із розплаву, характеризується виходом на насичення при тиску $X \approx 0,6$ ГПа (крива 1, рис. 1) і наступним незначним ($\approx 1\%$) лінійним зменшенням опору, пов'язаним зі зміною геометричних розмірів зразка в ділянці пружної деформації.

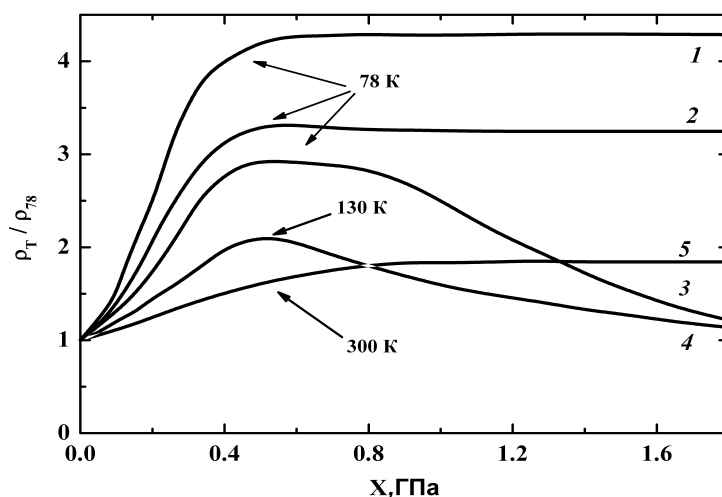


Рис. 1. Залежності поздовжнього тензорезистивного ефекту $\rho_x / \rho_0 = f(X)$ для n-Si легованого фосфором під час вирощування (крива 1) і нейтронно-легованого (криві 2-5) в умовах $X \parallel [001] \parallel \vec{j}$: за температур T , К: 1-3 – 78, 4 – 130, 5 – 300; дозах γ -опромінення Φ , квант/см²: 1, 2 – 0; 3-5 – $2,1 \times 10^{17}$.

Для НЛ кремнію характерною ознакою поздовжнього ТР ефекту, який вимірювався при $T = 78$ К (крива 2, рис. 1), є наявність максимуму при тиску $X \approx 0,55$ ГПа і поступове експоненціальне зменшення питомого опору ($\approx 5\%$) зі збільшенням тиску до 1,8 ГПа після завершення переселення електронів із долин, котрі піднімаються за енергією, у долини, енергія яких зменшується з тиском $X \parallel [001]$. Результати розрахунків засвідчують, що при таких значеннях одновісного тиску відбувається повне переселення електронів із «верхніх» долин у «нижні», оскільки енергетичне розщеплення долин $\delta\epsilon$ значно перевищує енергію kT ($\delta\epsilon > 10kT$) [6]. Величину енергетичного розщеплення Δ_1 -долин $\delta\epsilon$ можемо визначити за допомогою співвідношення

$$\delta\epsilon = \frac{\Xi_u X}{C_{11} - C_{12}}, \quad (1)$$

де Ξ_u – константа деформаційного потенціалу; C_{11} , C_{12} – пружні константи; X – величина тиску.

Як відомо, для кремнію енергія основного стану мілкового донорного центра при деформації $X \parallel [001]$ визначаємо [2; 10] співвідношенням

$$E(A_1) = \frac{\Delta_2}{2} + \frac{\Xi_u(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx})}{6} - \frac{1}{2} \left[\Delta_2^2 + \frac{3}{2} \Delta_2 \Xi_u(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) + (\Xi_u(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}))^2 \right]^{1/2} \quad (2)$$

де $\Xi_u = 9,3$ еВ [4] – константа деформаційного потенціалу; ε_{zz} , ε_{xx} – компоненти тензора деформації; Δ_2 – енергетичне розщеплення між синглетом і дублетом, зумовлене хімічним зсувом (для домішки фосфору в кремнії $\Delta_2 = 15$ меВ [10]).

Зменшення з тиском енергії іонізації мілкого донорного центра визначається третім членом співвідношення (2). Результати розрахунків засвідчують, що найбільш суттєве (нелінійне з тиском) зменшення енергії іонізації водневоподібного домішкового центра, яке складає величину порядку $\Delta_2/2$, відбувається при тисках до $(0,2 \div 0,4)$ ГПа. Подальша зміна енергії іонізації зі збільшенням одновісного тиску $X \parallel [001] \parallel \vec{j}$ відбувається повільніше й майже лінійно з тиском. Тому вище згадане експоненціальне зменшення питомого опору в НЛ кремнії в ділянці тисків $(0,5 \div 1,8)$ ГПа пов'язуємо з деформаційно-індукованою іонізацією енергетичних рівнів термодонорів, які виникають у нейтронно-легованих кристалах унаслідок технологічного високотемпературного відпалу.

Характер температурної залежності коефіцієнта Холла для недеформованих зразків трансмутаційно-легованого кремнії, які не піддавались γ -опроміненню (крива 1, рис. 2), засвідчують наявність двох рівнів: енергетичного рівня фосфору, який повністю іонізується при $T \approx 100$ К (рівень I, рис. 2), енергетичного рівня, що іонізується при $T \approx 120$ К (рівень II, рис. 2) [3].

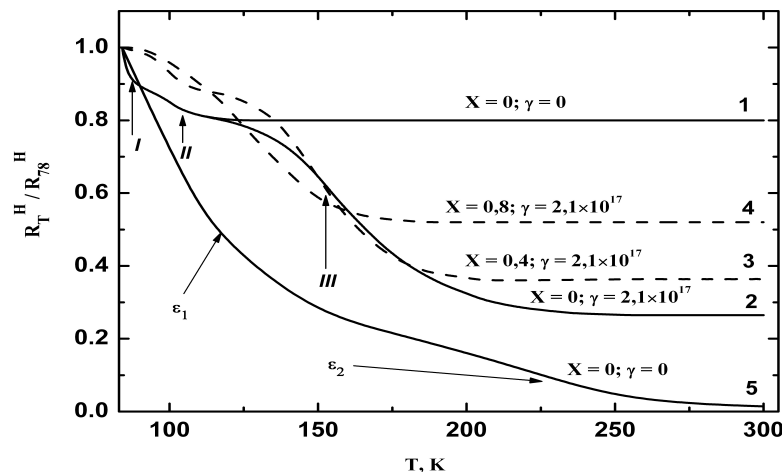


Рис. 2. Температурні залежності відносної зміни коефіцієнта Холла $R_T^H / R_{78}^H = f(T)$ за різних значень одновісного тиску X (ГПа) і дозах γ -опромінення Φ (квант/см²) для нейтронно-легованого кремнії N_p , см⁻³: 1-4- $3,2 \times 10^{14}$, 5- 2×10^{13}

Наявність у НЛ кристалах рівнів з енергіями активації, які перевищують енергію іонізації фосфору, може пов'язуватися з генерацією при високотемпературному технологічному відпалі термодонорів, які виникають у Si з високим умістом кисню (кремній, вирощений за методом Чохральського) [1; 7; 8].

Аналіз температурних залежностей тензо-холл-ефекту (криві 1–3, рис. 2) засвідчує, що повна іонізація домішки фосфору відбувається за незначних тисків $(0,2 \div 0,4)$ ГПа, що також підтверджує вищепредставлені залежності поздовжнього тензорезистивного ефекту для НЛ кремнії й теоретичні розрахунки впливу одновісного тиску на енергетичне положення основного стану мілких донорних рівнів [2; 10].

Отже, суттєве зменшення енергії іонізації фосфору в ділянці порівняно невеликих тисків (криві 1–3, рис. 2), наявність рівнів термодонорів і їх залежність положення від тиску визначають особливості тензорезистивних ефектів у нейтронно-легованому кремнії при тисках у ділянці $(0 \div 1,8)$ ГПа (див. рис. 1).

У γ -опроміненних кристалах НЛ кремнії спостерігаємо більш суттєве зменшення опору кристалів в межах тисків $(1,0 \div 1,8)$ ГПа (крива 3, рис. 1), що пов'язано з наближенням до зони провідності зі зростанням тиску рівня А-центру ($E_C - 0,17$ еВ) (пара вакансія-атом кисню) [9] (рівень III,

рис. 2) і додатковою іонізацією вільних електронів. Під час зростання температури внаслідок часткової термічної іонізації А-центра простежуємо зменшення впливу деформаційно-індукованої іонізації радіаційного дефекту (крива 4, рис. 1, $T = 130$ К). При $T = 300$ К унаслідок повної термічної іонізації А-центра характер зміни питомого опору з тиском (крива 5, рис. 1) визначається механізмом міждолинного перерозподілу електронів і залежністю від тиску ймовірності f -переходів, які роблять основний внесок у міждолинне розсіювання електронів у кремнію за температури $T > 100$ К [4]. Оскільки термічна активація термодонорів (ТД-II) відбувається за нижчої температури, ніж термічна активація А-центра, наявність ТД-II в об'ємі кристалу також не впливає на характер залежностей $\rho_x/\rho_0 = f(X)$ за $T=300$ К (крива 5, рис. 1).

Для одержання прийнятної точності визначення енергії активації високотемпературних термодонорів досліджено ефект Холла на високоомних кристалах нейтронно легованого кремнію ($N_P = 2 \times 10^{13} \text{ см}^{-3}$, $\rho_{78} = 1050 \text{ Ом}\cdot\text{см}$). Оскільки в таких кристалах домішка фосфору повністю іонізована за $T = 78$ К, зміна концентрації вільних електронів, яка спостерігається зі зростанням температури в ділянці $(78 \div 300)$ К, відбувається за рахунок термічної іонізації термодонорів.

На температурній залежності коефіцієнта Холла (крива 5, рис. 2) спостерігаємо наявність двох рівнів ϵ_1, ϵ_2 . Використовуючи температурну залежність коефіцієнта Холла (крива 5, рис. 2) та побудувавши графік $\log(RT^{3/4}) = f(10^3/T)$ (рис. 3), знайдено енергію активації цих рівнів $\epsilon_{i1} = 72,5 \pm 1,5 \text{ меВ}$ і $\epsilon_{i2} \approx 257 \text{ меВ}$, які слід віднести до термодонорів, які виникають унаслідок високотемпературного технологічного відпалу нейтронно-легованого кремнію.

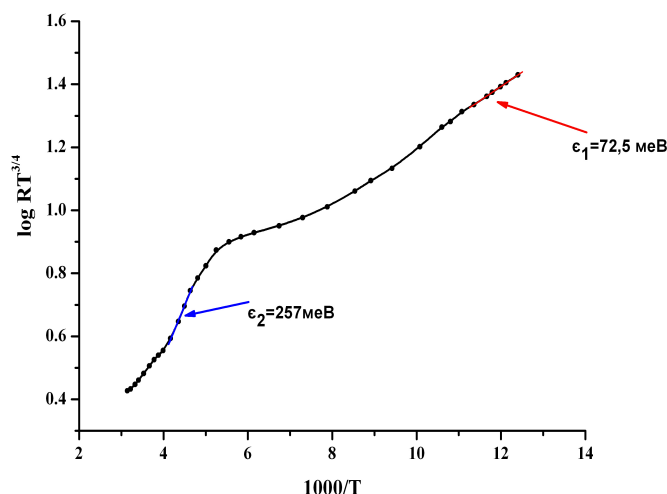


Рис 3. Залежність $\log(RT^{3/4}) = f(10^3/T)$ для високоомного нейтронно-легованого n-Si(P) з $N_P = 2 \times 10^{13} \text{ см}^{-3}$

На основі одержаних даних зіставлено головні характеристики й параметри НЛ n-Si(P) і кремнію, легованого фосфором під час вирощування. Установлено, наприклад, що такі фундаментальні параметри кристалів, як константи деформаційного потенціалу, пружні константи та механічна міцність, збігаються в межах точності експериментальних методів, які використовувалися для визначення вказаних параметрів.

Висновки та перспективи подальшого дослідження. На основі аналізу результатів досліджень тензорезистивного ефекту, температурних залежностей цих ефектів і залежностей відношення концентрацій електронів у Δ_1 -долинах визначено механізми тензоефектів у сильно деформованих НЛ кристалах n-Si(P), які піддавались опроміненню різними дозами γ -квантів. Установлено, що поряд із класичними механізмами перерозподілу електронів (механізм Сміта-Херрінга) домінуючими механізмами тензоефектів є додаткова деформаційно-індукована іонізація енергетичних станів радіаційних дефектів (фосфор, А-центри) і термодонорів-II технологічного походження, які виникають унаслідок

відпалу кристалів після опромінення повільними нейтронами. Суттєва деформаційно-індукована іонізація енергетичних станів зазначених дефектів відбувається в різних ділянках одновісного тиску $X \parallel [001]$: фосфору – $(0 \div 0,4)$ ГПа, термодонорів-II – $(0,5 \div 1,2)$ ГПа, А-центра – $(1,0 \div 1,8)$ ГПа. При підвищенні температури $T > 100$ К значний внесок у тензоефекти поряд із зазначеними вище механізмами робить також залежність від тиску ймовірності f -переходів, які фактично повністю визначають міждолинне розсіювання електронів у кремнію. Визначено енергії активації термодонорів-II у високоомному кремнії ($\rho_{300} = 200$ Ом \times см, $\rho_{78} = 1050$ Ом \times см): $\varepsilon_{i1} = 72,5 \pm 1,5$ меВ і $\varepsilon_{i2} \approx 257$ меВ.

Джерела та література

1. Бабич В. М. Кислород в монокристаллах кремния / В. М. Бабич, Н. И. Блецкан, Е. Ф. Венгер. – Киев : Интерпрес ЛТД, 1997. – 239 с.
2. Бир Г. Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках / Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. – М. : Наука, 1972. – 584 с.
3. Механізми тензоефектів, нейтронно легованих і γ -опроміненних кристалів n-Si(P) / С. І. Будзуляк, В. М. Єрмаков, В. В. Коломoeць [та ін.] // Доп. НАНУ – 2000. – № 9. – С. 79–86.
4. Определение сдвиговой константы деформационного потенциала в кремнии / П. И. Баранский, И. В. Даховский, В. В. Коломoeц, А. В. Федосов // Физика и техника полупроводников. – 1976. – Т. 10, № 7. – С. 1387–1389.
5. Defect states in transmutation-doped γ -irradiated Cz-Si crystals under high uniaxial pressure / S. I. Budzulyak, Yu. P. Dotsenko, V. M. Ermakov [et al.] // Physica B. – 2001. – Vol. 302–303. – P. 12–16.
6. Silicon and Germanium Energy Bands Transformation under Extremely High Uniaxial Stress / V. N. Ermakov, V. V. Kolomoets, L. I. Panasyuk, V. E. Rodionov // Proc. 20th Internat. Conf. Phys. Semicond. (ICPS-20). – Vol. 3. – Thessaloniki, Greece / Ed. E. M. Anastasakis and J. D. Joannopoulos ; World Scientific Publ. Co., Singapore. – 1990. – P. 1803–1806.
7. Structures of Thermal Double Donors in Silicon / M. Pesola, Lee Young Joo, J. von Boehm [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2000. – Vol. 84, № 23. – P. 5343–5346.
8. Oxygen Agglomeration and Formation of Oxygen-related Thermal Donors in Heat-treated silicon / V. V. Emtsev, A. J. Ammerlaan, G. A. Oganesyanyan, A. Misiuk // Cryst. Res. Technol. – 2003. – Vol. 38, № 3–5. – P. 394–398.
9. Watkins G. D. Defects in irradiated silicon / G. D. Watkins, J. W. Corbet // Phys. Rev. – 1961. – Vol. 121. – P. 1001–1014.
10. Wilson D. Electron Spin Resonance Experiments on Donors in Silicon. Investigation of Excited States by the Application of Uniaxial Stress and Their Importance in Relaxation Processes / D. Wilson, G. Fecher // Phys. Rev. – 1961. – Vol. 124, № 4. – P. 1068–1083.

Панасюк Леонид, Коломoeць Владимир, Федосов Сергей. Механізми тензоефектів в нейтронно-легированном γ -облученном n-Si(P) при сильных одноосных давлениях. С целью определения энергии активации высокотемпературных термодоноров технологического происхождения и влияния сильных одноосных давлений на положение энергетических состояний дефектов в нейтронно-легированном γ -облученном n-Si(P) исследованы эффект Холла, тензо-холл-эффект, тензорезистивный эффект. На основе полученных данных проводится сопоставление главных характеристик и параметров нейтронно-легированного n-Si(P) и кремния, легированного фосфором во время выращивания.

Ключевые слова: энергия активации, технологические термодоноры, трансмутационно-легированный, эффект Холла, тензоефект.

Panasjuk Leonid, Kolomoets Volodymyr, Fedosov Sergii. Mechanisms of Tenseffects in the Neutron-Doped γ -irradiation n-Si(P) with Strong Uniaxial Pressures. Activation energy of high temperature technological thermodonors has been determined in transmutation-doped n-Si(P) using the data analysis of the Hall-effect temperature dependence. Physical mechanisms of tenseffects in n-Si(P) crystals doped by neutron irradiation and doped at growth were studied by the tenseffects measurements and by analysis of the pressure dependencies of the electron concentration ratio in “upper” and “lower” Δ_1 -valleys of uniaxially strained samples. Comparison of the some parameters for the crystals doped either by neutron transmutation method or in the melt is carried out.

Key words: activation energy, technological thermodonors, transmutation-doped, Hall-effect, tenseffects.

Стаття надійшла до редколегії
02. 03. 2015 р.