

УДК 532.2

## ИЗМЕНЕНИЕ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ НАНОРАЗМЕРНЫХ ОБЛАСТЕЙ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ, СОЗДАНЫХ ЭЛЕКТРОНАМИ В КРЕМНИИ

*Богатов Н. М.<sup>1</sup>, Коваленко М. С.<sup>2</sup>*

THE DENSITY CHANGING OF ELECTRONIC STATES OF NANOSCALE DISORDERED AREAS  
CREATED BY ELECTRONS IN SILICON

Bogatov N. M., Kovalenko M. S.

The dependences on the energy of density distribution of the electronic states in the forbidden zone of silicon are calculated numerically for the various parameters values of the nanoscale disordered areas. It is shown, that in the forbidden zone the power levels created by chaotically distributed vacancies within nanoscale disordered area are prevailed.

Keywords: silicon, disordered area, electronic states

### Введение

Успехи в области микропроцессорной техники выдвигают задачу поиска и изучения возможностей создания миниатюрных сверхчувствительных датчиков электромагнитного излучения и сенсорных устройств. С этой целью необходим поиск новых материалов, в которых малые воздействия электромагнитного излучения, внешней среды могут вызывать существенные изменения комплекса свойств. Особый интерес представляют полупроводниковые структуры с наномасштабными неоднородностями.

В современной нанoeлектронике основное внимание уделяется исследованиям структур с квантовыми ямами и квантовыми точками [1]. Обзор способов получения материалов с наноразмерными объектами содержится в [2]. Создание наноразмерных областей разупорядочения воздействием ионизирующими частицами — метод, возможности которого полностью не изучены. Новые свойства структур на основе кремния с наноразмерными областями разупорядочения обсуждаются в [3]. Для разработки приборов на основе кремния с наноразмерными областями разупорядочения необходимо определить влияние этих областей на распределе-

ние электронных состояний в запрещенной зоне, так как они проявляют электрическую и рекомбинационную активность.

Цель работы — рассчитать изменение плотности электронных состояний, созданных наноразмерными областями разупорядочения в кремнии, облученном электронами.

### 1. Образование областей разупорядочения в кремнии под действием ионизирующих частиц

Области разупорядочения образуются в каскаде смещений, если кинетическая энергия  $T_k$  первично смещенного атома Si превышает пороговое значение  $T_{do}$ ,  $T_k > T_{do}$ . В кремнии  $T_{do} = 20$  КэВ [4]. Среднее число разделенных пар Френкеля в каскаде смещений характеризуется каскадной функцией  $\nu(T_k)$ . Простая каскадная функция, учитывающая потери энергии первичного атома при упругих столкновениях с атомами решетки и неупругих столкновениях с электронами вещества, предложена Кинчином и Пизом [5]. В расчетах используем более точную зависимость  $\nu(T_k)$ , построенную Линдхардом — Нельсоном — Шарфом — Томсо-

<sup>1</sup>Богатов Николай Маркович, д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой физики и информационных систем Кубанского государственного университета; e-mail: bogatov@phys.kubsu.ru

<sup>2</sup>Коваленко Максим Сергеевич, аспирант кафедры физики и информационных систем Кубанского государственного университета; e-mail: makc69@rambler.ru

ном [6], учитывающую взаимодействие первичного атома с электронами вещества.

Вакансии и междоузельные атомы Si, образовавшиеся в результате разделения пар Френкеля, взаимодействуют на стадии каскадного размножения, вакансии и междоузельный атом, остановившийся около нее, могут аннигилировать, вакансии объединяются в дивакансии, тривакансии, тетравакансии и более сложные скопления [4]. Многовакансионные комплексы играют роль зародышей аморфной фазы или областей разупорядочения.

Область каскада характеризуется понятием «средний кластер» [7], который приближенно имеет форму эллипсоида [8]. Без учета эффекта каналирования средний кластер имеет вид сферы диаметром  $R_p$ , равным среднему проективному пробегу первоначально выбитого атома Si [9]. Междоузельный кремний распределен в поверхностной области, а вакансии — в объеме среднего кластера [8].

Определим размер области разупорядочения. Обозначим через  $r_{vi}$  радиус реакции разделившихся V, Si<sub>I</sub>. В среднем кластере выделим сферическое ядро, содержащее вакансии радиусом  $r_c = (R_p/2 - r_{vi})$  и поверхностную область с  $r_c \leq r < R_p/2$ , где находятся атомы Si<sub>I</sub>. Вероятность избежать аннигиляции для разделившихся вакансии V и междоузельного атома Si<sub>I</sub>, расположенных на расстоянии  $d \leq r_{vi}$  друг от друга, обозначим  $\omega_d = 6\omega_1\omega_c$ , где  $6\omega_c$  — вероятность того, что атом Si<sub>I</sub> окажется в пространственном положении Q вокруг V, допускающем заряженное состояние метастабильной пары V, Si<sub>I</sub>,  $\omega_1$  — вероятность того, что метастабильная пара в конфигурации Q заряжена [4, 10, 11]. Заряженное состояние образуется в одном из шести симметричных направлений (3 оси S<sub>4</sub>) группы симметрии тетраэдра T<sub>d</sub>.

$$\omega_1 = \left[ 1 + g_1 \exp \left\{ \frac{F - E_f}{k_B T} \right\} \right]^{-1}, \quad (1.1)$$

где  $F$  — уровень Ферми,  $T$  — температура,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $g_1 = 0,5$  [12] для мелкозалегающего уровня  $E_f = E_c - 0,07$  эВ [10]. Тогда вероятность аннигиляции в оболочке атома Si<sub>I</sub>, оказавшихся на поверхности кластера, равна  $1 - \omega_d$ .

Среднюю плотность вакансий в области разупорядочения  $N_{vr}$ , количество вакансий

$K_{ve}$  и междоузельного кремния  $K_{ie}$  в поверхностной области найдем в виде

$$N_{vr} = \frac{6\nu(T_k)}{\pi R_p^3},$$

$$K_{ve} = \nu(T_k) \left( 1 - \left( 1 - \frac{2r_{vi}}{R_p} \right)^3 \right), \quad (1.2)$$

$$K_{ie} = \nu(T_k) (1 - \omega_d).$$

Функция  $R_p(T_k)$  при  $T_k \geq 10^4$  эВ рассчитана в [9, 13] при  $T_k < 10^4$  эВ использовались значения  $R_p$ , полученные аппроксимацией.

Рассмотрим два случая, соответствующих неравенствам  $K_{ie} \geq K_{ve}$  и  $K_{ie} < K_{ve}$ . В первом случае аннигилируют  $K_{ve}$  пар V, Si<sub>I</sub>, остальные атомы Si<sub>I</sub> отделены от вакансий расстоянием  $r > r_{vi}$  и дают вклад в концентрацию первичных дефектов. Во втором случае аннигилируют  $K_{ie}$  пар V, Si<sub>I</sub>, объем ядра увеличивается за счет внутренней части оболочки, занятой неаннигилировавшими вакансиями. Тогда объем ядра определяется формулой

$$v_c = \pi(R_p - 2r_{vi})^3/6 + \Delta v_c, \quad (1.3)$$

где  $\Delta v_c = \begin{cases} 0 & \text{при } K_{ie} \geq K_{ve}, \\ (K_{ve} - K_{ie})/N_{vr} & \text{при } K_{ie} < K_{ve}. \end{cases}$

Среднее количество междоузельных атомов, избежавших аннигиляции,

$$\nu_i = \begin{cases} \nu(T_k) (1 - 2r_{vi}/R_p)^3 & \text{при } K_{ie} \geq K_{ve}, \\ \nu(T_k)\omega_d & \text{при } K_{ie} < K_{ve}. \end{cases} \quad (1.4)$$

Найденные в результате сопоставления рассчитанных и экспериментальных величин скоростей генерации первичных радиационных дефектов значения  $r_{vi} = 2,8a$  ( $a$  — период решетки),  $\omega_c = 0,0089$ .

Дивакансии образуются преимущественно в ядре из вакансий, расположенных в объеме сферы реакции  $v_w$ . Энергия связи двух вакансий  $E_{dw} \geq 1,6$  эВ [10], поэтому диссоциация дивакансий в интересующей нас области температур  $T \leq 400$  К не учитывается. Считаем, что в образовании дивакансии участвует вакансия, ближайшая к данной в пределах объема  $v_w$ . Вероятность обнаружения ближайшей вакансии в объеме  $v_w$  найдем из распределения Пуассона

$$\omega_w = 1 - \exp\{-N_{vr}v_w\}. \quad (1.5)$$

В данном случае  $v_w = 4\pi a^3/3$ . В каскаде, созданном атомом с энергией  $T_k < T_{do}$ ,

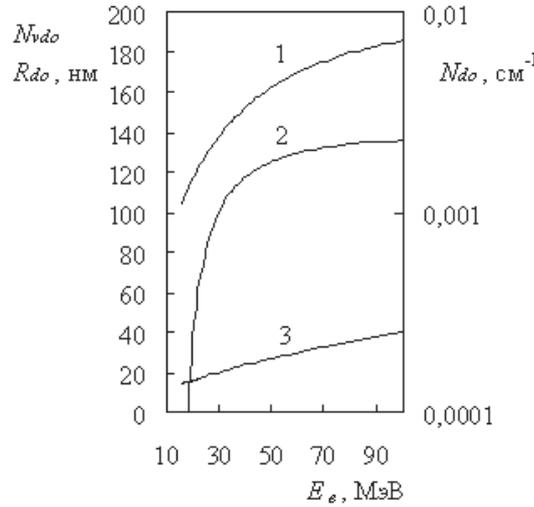


Рис. 1. Зависимость параметров области разупорядочения от энергии налетающих электронов: 1 —  $N_{vdo}$ ; 2 —  $N_{do}$ ; 3 —  $R_{do}$

$N_{vr}v_w \ll 1$ , поэтому образование многовакансионных комплексов в этом случае можно пренебречь.

Используя (1.5), найдем среднее количество дивакансий  $\nu_w$  и оставшихся вакансий  $\nu_v$

$$\nu_w = 0,5N_{vr}v_c(1 - \exp\{-N_{vr}v_w\}), \quad (1.6)$$

$$\nu_v = N_{vr}v_c \exp\{-N_{vr}v_w\}. \quad (1.7)$$

Формулы (1.6), (1.7) имеют смысл, если  $v_c > v_w$ .

Для областей разупорядочения определим следующие средние значения: радиус  $R_{do}$  и количество неаннигилировавших вакансий  $N_{vdo}$ , из которых формируется область разупорядочения,

$$R_{do} = \frac{\psi_1}{\psi_3}, \quad (1.8)$$

$$N_{vdo} = \frac{\psi_2}{\psi_3}, \quad (1.9)$$

$$\psi_1 = \int_{T_{do}}^{T_m} \left(\frac{3v_c}{4\pi}\right)^{1/3} \frac{d\sigma_d}{dT_k} dT_k,$$

$$\psi_2 = \int_{T_{do}}^{T_m} N_{vr}v_c \frac{d\sigma_d}{dT_k} dT_k, \quad \psi_3 = \int_{T_{do}}^{T_m} \frac{d\sigma_d}{dT_k} dT_k.$$

Здесь  $T_m$  — максимальная энергия, передаваемая узловому атому налетающей частицей.

Дифференциальное сечение рассеяния  $\sigma_d$  релятивистского электрона рассчитывалось по формуле Мак-Кинли – Фешбаха [4].

Среднее число областей разупорядочения, созданных одной ионизирующей частицей на единице длины её проективного пробега

$$N_{do} = N_0 \int_{T_{do}}^{T_m} \frac{d\sigma_d}{dT_k} dT_k, \quad (1.10)$$

где  $N_0$  — концентрация атомов Si в решетке кристалла

На рис. 1 показано рассчитанное по формулам (1.8)–(1.10) изменение параметров областей разупорядочения при облучении электронами.

Полученные зависимости среднего радиуса области разупорядочения  $R_{do}$  и числа неаннигилировавших вакансий  $N_{vdo}$ , из которых она формируется, от энергии ионизирующих частиц показывают, что области разупорядочения являются наномасштабными объектами с радиусом от 10 до 100 нм, содержащими большое число нарушенных валентных связей.

## 2. Плотность электронных состояний в запрещенной зоне, созданных областями разупорядочения

Рассмотрим образование плотности электронных состояний в запрещенной зоне кремния, созданных областями разупорядочения. Область разупорядочения характеризуется

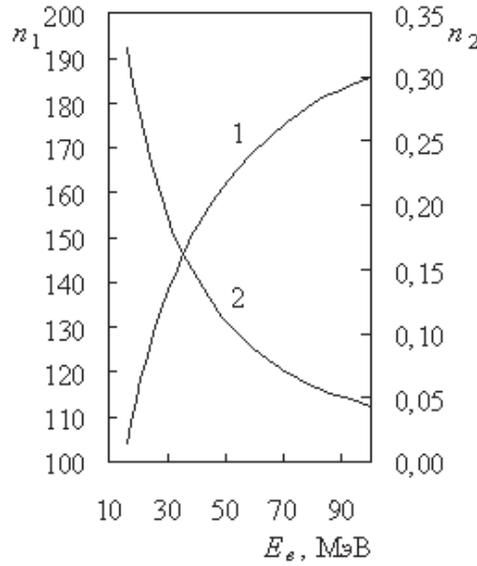


Рис. 2. Зависимость числа вакансий  $n_1$  и дивакансий  $n_2$  в области разупорядочения от энергии налетающих электронов: 1 —  $n_1$ ; 2 —  $n_2$

средними значениями радиуса  $R_{do}$  и числа неаннигилировавших вакансий  $N_{vdo}$ .

Многовакансионные комплексы зарождаются в зоне неустойчивости объемом  $v_w = 4\pi a^3/3$ . Число таких зон в области разупорядочения  $n = (R_{do}/a)^3$ . Вероятность объединения  $k$  случайно расположенных вакансий в объеме  $v_w$  определяется распределением Пуассона [4]

$$\omega_k = \frac{(N_{vr}v_w)^k}{k!} \exp\{-N_{vr}v_w\}, \quad (2.1)$$

где  $N_{vr} = \frac{3N_{vdo}}{4\pi R_{do}^3}$  — средняя концентрация вакансий в области разупорядочения.

Число  $k$ -вакансионных комплексов в области разупорядочения  $n_k = n \cdot \omega_k$ . Комплекс из  $k$  вакансий создает в запрещенной зоне  $m_k$  энергетических уровней  $E_{ki}$ ,  $i = 1, \dots, m_k$ ,  $g_{ki}$  — фактор вырождения уровня. Тогда распределение электронных состояний в запрещенной зоне описывается формулой

$$N(E) = \sum_{k=1}^{\infty} n_k \sum_{i=1}^{m_k} g_{ki} \delta(E - E_{ki}), \quad (2.2)$$

где  $\delta(x - b)$  —  $\delta$ -функция Дирака.

В реальном материале вследствие флуктуаций распределения  $k$ -вакансионных комплексов в области разупорядочения и температурного размытия уровней распределение электронных состояний из дискретного (2.2)

превращается в квазинепрерывное. Учитывая этот факт, заменим  $\delta$ -функции Дирака функциями Гаусса:

$$N(E) = \sum_{k=1}^{\infty} n_k \sum_{i=1}^{m_k} \frac{g_{ki}}{\sqrt{\pi}\sigma_k} \times \exp\left\{-\frac{(E - E_{ki})^2}{\sigma_k^2}\right\}, \quad (2.3)$$

где  $\sigma_{ki} = \sqrt{n_k} \Delta E_{ki} + k_B T$ ,  $\sqrt{n_k}$  — среднее число комплексов в флуктуации,  $\Delta E_{ki}$  — величина расщепления энергии  $i$ -уровня  $k$ -вакансионного комплекса вследствие взаимодействия с окружающими комплексами, образующими флуктуацию.

Экспериментальные значения энергетических уровней вакансий и многовакансионных комплексов приведены в [4, 10, 14, 15]. Воспользуемся этими значениями для расчета плотности электронных состояний (2.3). Расчет по формуле (2.1) показывает, что во всем диапазоне параметров наноразмерных областей разупорядочения  $N_{vdo}$ ,  $R_{do}$  (рис. 1) количество вакансий  $n_1$  много больше, чем дивакансий  $n_2$  (рис. 2) и других многовакансионных комплексов. Следовательно, в формуле (2.3) основной вклад дают слагаемые с  $k = 1$ .

Задача определения величины расщепления энергетических уровней вследствие взаимодействия  $k$ -вакансионных комплексов в области разупорядочения не решена, экспери-

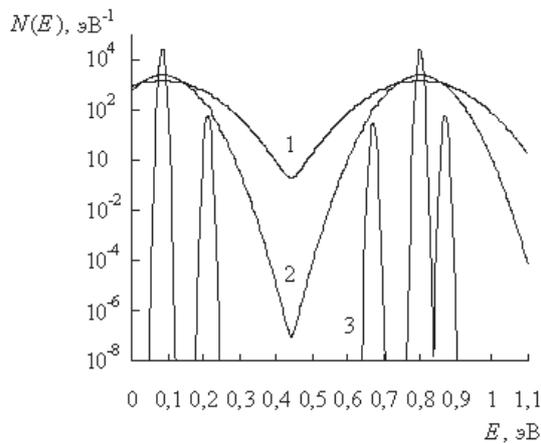


Рис. 3. Распределение плотности электронных состояний в запрещенной зоне Si в области разупорядочения, созданной электроном с энергией  $E_e = 20$  МэВ: 1 —  $\Delta E_{ki} = 0,01$  эВ; 2 —  $\Delta E_{ki} = 0,006$  эВ; 3 —  $\Delta E_{ki} = 0$  эВ

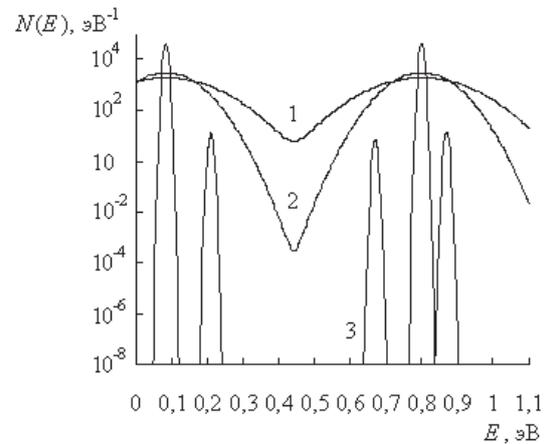


Рис. 4. Распределение плотности электронных состояний в запрещенной зоне Si в области разупорядочения, созданной электроном с энергией  $E_e = 80$  МэВ: 1 —  $\Delta E_{ki} = 0,01$  эВ; 2 —  $\Delta E_{ki} = 0,006$  эВ; 3 —  $\Delta E_{ki} = 0$  эВ

ментальные или теоретические оценки  $\Delta E_{ki}$  в научной литературе отсутствуют, поэтому зависимость  $N(E)$  рассчитана для ряда значений  $\Delta E_{ki}$ . На рис. 3, 4 продемонстрирована тенденция изменения  $N(E)$  с ростом  $\Delta E_{ki}$  при  $T = 80$  К, соответствующей условиям возможного эксперимента.

Если взаимодействие  $k$ -вакансионных комплексов отсутствует ( $\Delta E_{ki} = 0$  эВ), то зависимость  $N(E)$  представляет собой набор пиков, обусловленных тепловым размытием энергетических уровней в запрещенной зоне. Наибольший вклад дают вакансионные уровни:  $E_{11} = E_v + 0,084$  эВ,  $E_{12} = E_c - 0,03$  эВ. Вклад дивакансионных уровней  $E_{21} = E_v + 0,21$  эВ,  $E_{22} = E_c - 0,43$  эВ,  $E_{23} = E_c - 0,23$  эВ много меньше, чем вакансионных. В расчетах учитывались только стабильные состояния вакансий и дивакансий. С увеличением энергии взаимодействия  $\Delta E_{ki} = 0,006$  эВ,  $\Delta E_{ki} = 0,01$  эВ ( $k = 1, i = 1, 2$ ) пики вакансионного происхождения расширяются, уменьшаясь по высоте, и полностью перекрывают дивакансионные пики.

Электрон с энергией  $E_e = 20$  МэВ создает области разупорядочения с  $N_{vdo} = 118$ ,  $R_{do} = 16,1$  нм, а электрон с  $E_e = 80$  МэВ — области разупорядочения с  $N_{vdo} = 179$ ,  $R_{do} = 35,2$  нм. Увеличение  $N_{vdo}$  обуславливает как повышение максимумов  $N(E)$ , так и большее их расширение вследствие взаимодействия вакансий. Электроны с рассмотрен-

ными энергиями имеют достаточно большой проективный пробег, поэтому области разупорядочения создаются в объеме Si.

## Заключение

Параметры областей разупорядочения, образующихся в кремнии под действием электронов, рассчитаны численно с помощью построенной модели. Полученные зависимости среднего радиуса  $R_{do}$  и числа неаннигилировавших вакансий  $N_{vdo}$  в области разупорядочения от энергии электронов показывают, что области разупорядочения являются наномасштабными объектами с радиусом от 10 до 100 нм.

Во всем диапазоне параметров наноразмерных областей разупорядочения  $R_{do}$ ,  $N_{vdo}$  количество вакансий много больше, чем дивакансий и других многовакансионных комплексов. Поэтому основной вклад в распределение плотности состояний дают уровни вакансионного происхождения. Вследствие расщепления энергетических уровней вакансий, образующих флуктуации, формируется квазинепрерывный спектр электронных состояний в запрещенной зоне, имеющий два основных максимума.

В области разупорядочения достигается высокая плотность нарушенных валентных связей. Эти состояния могут служить центрами захвата неравновесных электронов или дырок. Следовательно, области разупо-

рядочения могут играть роль наноразмерных центров неравновесного объёмного заряда.

Воздействуя локально потоком электронов с заданной энергией, можно создавать области разупорядочения как конструктивные элементы полупроводниковых приборов. Таким образом, можно управлять электрической и рекомбинационной активностью полупроводниковых структур в наноразмерных областях посредством изменения числа нарушенных валентных связей в них.

### Литература

1. Нанoeлектроника. Часть 1. Введение в нанoeлектронику / Под. ред. Орликовского А. А. М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2009. 720 с.
2. Суздальев И. П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: КомКнига, 2006. 592 с.
3. Богатов Н. М., Коваленко М. С. Кремний с наноразмерными областями разупорядочения // Современные наукоёмкие технологии. 2008. № 2. С. 109–110.
4. Кузнецов Н. В., Соловьёв Г. Г. Радиационная стойкость кремния. М.: Энергоатомиздат. 1989. 96 с.
5. Кинчип Г. Х., Пиз Р. С. Смещение атомов твёрдых тел под действием излучения // Успехи физ. наук. 1956. Т. 60. № 4. С. 590–615.
6. Lindhard J., Nielson V., Scharff M., Thomson P. V. Integral equations covering radiation effects notes an atomic collision II // Kgl. Danske Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd. 1963. Vol. 33. № 10. P. 14–42.
7. Van Lint V. A., Leadon R. E., Colwell J. F. Energy dependence of displacement effects in semiconductors // IEEE Trans. of Nucl. Sci. 1972. Vol. NS-19. № 6. P. 181–185.
8. Van Lint V. A., Leadon R. E. Implications of cluster model of neutron effects in silicon // Lattice Defects in Semiconductors. Conf. 1974. London–Bristol. Institute of Physics. 1975. P. 227–232.
9. Буренков А. Ф., Комаров Ф. Ф., Кумахов М. А., Темжин М. М. Таблицы параметров пространственного распределения ионно-имплантированных примесей (теория, метод расчёта, таблицы). Минск. БГУ. 1980. 352 с.
10. Емцев В. В., Машовец Т. В. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках. М.: Радио и связь. 1981. 248 с.
11. Бургуэн Ж., Ланно М. Точечные дефекты в полупроводниках. Т. 2. Экспериментальные аспекты. М.: Мир. 1985. 304 с.
12. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. М.: Наука. 1977. 672 с.
13. Andersen H. H., Csete A., Ichioka T., Knudsen H., Moller S. P., Uggerhoj U. I. An apparatus to measure stopping powers for low-energy antiprotons and protons // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2002. Vol. 194. P. 217–225.
14. Вавилов В. С., Киселев В. Ф., Мукашев Б. Н. Дефекты в кремнии и на его поверхности. М.: Наука, 1990. 216 с.
15. Nieminen R. M., Puska M. J. Vacancy defects in c-Si: electronic and ionic structures // Properties of Crystalline Silicon, London: INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, 1999. P. 309–318.

Ключевые слова: кремний, область разупорядочения, электронные состояния