

P14-2003-201

Т. Н. Мамедов, Д. Г. Андрианов¹, Д. Герлах²,
В. Н. Горелкин³, А. В. Стойков, У. Циммерманн²

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ИОНИЗАЦИИ
АКЦЕПТОРНОЙ ПРИМЕСИ АЛЮМИНИЯ
В КРЕМНИИ**

Направлено в журнал «Письма в ЖЭТФ»

¹Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет», 109017, Москва, Россия

²Paul Scherrer Institut, CH-5232 Villigen PSI, Switzerland

³Московский физико-технический институт, 141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Исследования [1, 2] показывают, что применение поляризованных отрицательных мюонов позволяет получать обширную информацию о взаимодействиях акцепторных центров (АЦ) в кремнии. При имплантации μ^- в Si образуется мюонный атом ${}_{\mu}\text{Al}$, который моделирует акцепторную примесь алюминия. Информация о зарядовом состоянии электронной оболочки данного мюонного атома (АЦ) и о его взаимодействиях со средой содержится в функции поляризации $P(t)$ мюона, находящегося на 1s-уровне атома ${}_{\mu}\text{Al}$.

В перпендикулярном спину мюона магнитном поле поведение поляризации мюона описывается системой дифференциальных уравнений [3]

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_p &= (i\omega_p - \lambda_p - \nu_i) P_p + \nu_c P_d, \\ \frac{d}{dt} P_d &= \nu_i P_p + (i\omega_d - \nu_c) P_d, \end{aligned} \quad (1)$$

где индексы “p” и “d” обозначают соответственно парамагнитное (нейтральное) и диамагнитное (ионизованное) состояния АЦ – ${}_{\mu}\text{Al}^0$ и ${}_{\mu}\text{Al}^-$; P_p и P_d – комплексные величины (экспериментально наблюдаемой величиной является $P = \text{Re}(P_p + P_d)$); ν_i – скорость ионизации АЦ; ν_c – скорость захвата дырки на ${}_{\mu}\text{Al}^-$; ω_p и ω_d – частоты прецессии спина мюона; λ_p – скорость релаксации спина мюона в парамагнитном состоянии. В приближении изотропного сверхтонкого взаимодействия магнитных моментов мюона и электронной оболочки АЦ, парамагнитный сдвиг частоты прецессии и скорость релаксации спина мюона определяются как [4]

$$\frac{\omega_p - \omega_d}{\omega_d} = -\frac{g\mu_B}{2\mu_B^{\mu}} \cdot \frac{J(J+1)A}{3k_B T}, \quad (2)$$

$$\lambda_p = \frac{J(J+1)}{3} \left(\frac{(A/\hbar)^2}{\nu} + \frac{(A/\hbar)^2 \nu}{\nu^2 + \omega_c^2} \right), \quad (3)$$

где A – константа сверхтонкого взаимодействия; ν – скорость релаксации магнитного момента АЦ; $\hbar = h/2\pi$, h – постоянная Планка; k_B – постоянная Больцмана; μ_B и μ_B^{μ} – магнетон Бора для электрона и мюона соответственно; g – g-фактор для АЦ; $\omega_c = g\mu_B B/\hbar$ – угловая частота прецессии магнитного момента электронной оболочки АЦ в магнитном поле B ; T – температура. Для мелкого АЦ в кремнии $J = 3/2$ [5], $g = -1.07$ [6].

При условии, что в начальный момент времени заселяется только одно из зарядовых состояний АЦ, и переходы между состояниями отсутствуют

($\nu_1 = \nu_c = 0$), решение системы (1) имеет вид

$$P(t) = P_0 e^{-\lambda t} \cos(\omega t + \phi), \quad (4)$$

где P_0 – поляризация мюона на 1s-уровне при $t = 0$; $\lambda = \lambda_p(0)$, $\omega = \omega_p(\omega_d)$ в парамагнитном (диамагнитном) состоянии АЦ; ϕ – начальная фаза прецессии спина мюона.

Проведенные нами ранее исследования [1, 2] показывают, что функция вида (4) описывает экспериментальные данные для образцов невырожденного n- и p-типа кремния при $T \lesssim 50$ К, при этом наличие релаксации спина мюона и вид температурной зависимости ω свидетельствуют о том, что в начальный момент времени АЦ образуется в парамагнитном состоянии и вероятность его ионизации за время $\sim \tau_\mu$ ($\tau_\mu = 760$ нс – время жизни μ^- на 1s-уровне атома ${}_\mu\text{Al}$ [7]) пренебрежимо мала.

Однако в [8] при исследовании образца кремния с примесью фосфора $1.6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ было обнаружено, что зависимость $\Delta\omega/\omega_d = f(T)$ ($\Delta\omega = \omega - \omega_d$, ω – частота прецессии при температуре T) описывается $1/T$ -зависимостью (2) лишь при $T \lesssim 50$ К, в то время как уже при $T > 52$ К частота прецессии спина мюона соответствует диамагнитному состоянию АЦ. Был сделан вывод о том, что в данном образце при $T > 50$ К вероятность ионизации АЦ за время порядка τ_μ становится существенной. Однако имеющиеся в литературе данные о скорости таких процессов, как захват на акцепторный центр электронов из зоны проводимости и тепловая ионизация акцепторов, недостаточны для установления механизма ионизации АЦ. Разброс экспериментальных данных по величине коэффициента захвата электронов на нейтральный акцепторный центр в кремнии достигает пяти порядков [9]. Скорость тепловой ионизации примеси бора в кремнии была определена, например, в [10] и составила $\approx 2 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$ при $T = 21$ К. Однако температурной зависимости скорости ионизации (в диапазоне 11–21 К) соответствовала энергия ионизации бора 8.3 мэВ, что существенно меньше табличного значения данной величины (45 мэВ [11]). Отметим, что знание скорости тепловой ионизации мелких примесных центров крайне важно для оценки быстродействия полупроводниковых приборов, работающих при низких температурах [10, 12].

Настоящая работа была направлена на выяснение механизма ионизации АЦ ${}_\mu\text{Al}$ в Si и получение данных о скорости ионизации данного центра. С этой целью было исследовано поведение поляризации отрицательных мюонов в образцах кремния с примесью фосфора ($1.6 \cdot$

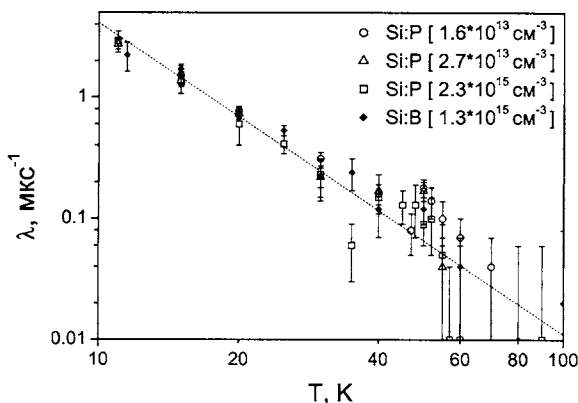


Рис. 1. Температурные зависимости скорости релаксации спина мюона. Пунктирная линия проведена для наглядности

10^{13} , $2.7 \cdot 10^{13}$ и $2.3 \cdot 10^{15}$ см^{-3}) и бора ($1.3 \cdot 10^{15}$ см^{-3}) в диапазоне температур 10 – 300 К.

Измерения были выполнены на спектрометре GPD [13], расположенном на мюонном канале μE1 ускорителя протонов Института Пауля Шеррера (PSI, Швейцария). Исследуемые образцы, вырезанные из монокристаллов кремния, имели форму дисков (диаметром ~ 30 мм и высотой ~ 12 мм) и устанавливались так, чтобы ось диска совпадала с осью пучка мюонов. Для создания магнитного поля на образце использовались кольца Гельмгольца. Величина магнитного поля составляла 2.5 кГс при долговременной стабильности не хуже чем 10^{-4} . Температура образцов поддерживалась с точностью 0.1 К.

Поляризация мюонов измерялась путем регистрации электронов распада из реакции $\mu^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$. При этом зависимость количества зарегистрированных электронов от времени имеет вид экспоненты, модулированной функцией $P(t)$. Методика измерений и процедура восстановления параметров поляризации спина мюона из аппаратурных μ^- -SR-спектров подробно описаны в [1, 3].

Температурные зависимости скорости релаксации λ и сдвига частоты прецессии спина мюона $\Delta\omega/\omega_d$ (в качестве ω_d принималась частота прецессии при комнатной температуре, равная (212.22 ± 0.05) рад/мкс), полученные в результате аппроксимации экспериментальных данных с использованием функции поляризации (4), представлены на рис. 1 и 2.

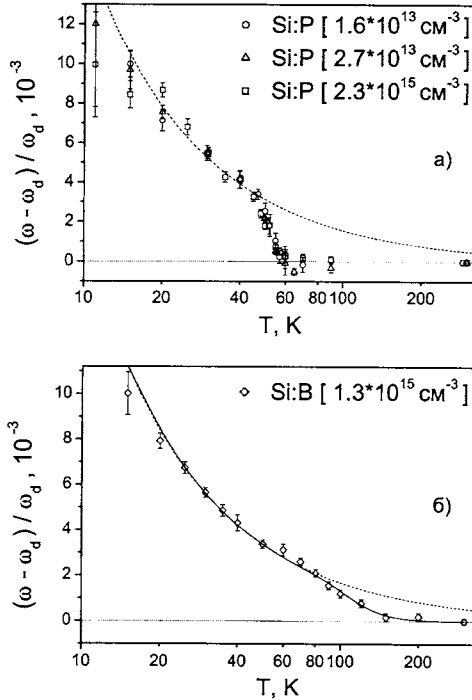


Рис. 2. Температурные зависимости сдвига частоты прецессии спина мюона для образцов кремния с примесью фосфора (а) и бора (б). Пунктирные линии соответствуют зависимости (2) при $A/h = 23.6$ МГц (а) и $A/h = 25.3$ МГц (б). Сплошная линия на (б) есть результат аппроксимации экспериментальных данных зависимостью (7) при $A/h = 25.3$ МГц и $E_i = 66.0$ мэВ

Как видно из рис. 1, скорость релаксации спина мюона для всех образцов возрастает с понижением температуры примерно как T^{-q} ($q \sim 3$). Такое поведение λ согласуется с полученными ранее данными для невырожденных образцов и обусловлено спин-решеточной релаксацией магнитного момента АЦ (см. [1, 2]).

Поведение сдвига частоты прецессии спина мюона в n-типа кремнии с примесью фосфора (рис. 2а) при $T \lesssim 45$ К описывается $1/T$ -зависимостью (2) при значении константы сверхтонкого взаимодействия $A/h = (23.6 \pm 0.4)$ МГц. При $T > 45$ К начинается отклонение

$\Delta\omega/\omega_d$ от зависимости (2) и при $T > 55$ К $\omega \approx \omega_d$. Таким образом, в диапазоне температур 45 – 55 К происходит переход от преимущественного заселения парамагнитного (неионизованного) состояния АЦ к преимущественному заселению диамагнитного (ионизованного) состояния. Очевидно, что данный переход связан с возрастанием скорости ν_i ионизации АЦ с ростом температуры. Скорость ν_c обратного процесса (захват дырки на μAl^-) в n-типа кремнии пренебрежимо мала. Действительно, исходя из принципа детального равновесия, имеем: $\nu_c/\nu_i = W_0/W_-$, где W_0 ($W_- = 1 - W_0$) – вероятность нахождения АЦ μAl в нейтральном (ионизованном) состоянии (в n-типа кремнии $W_0 = 0$, см. [8]). Решением (1) при $\nu_i \neq 0$, $\nu_c = 0$ и $\lambda \ll \delta = \omega_p - \omega_d$ (при $45 \leq T \leq 55$ К $\lambda \lesssim 10^5$ с⁻¹ и $\delta \approx 3 \cdot 10^{-3} \omega_d \approx 6 \cdot 10^5$ с⁻¹, см. рис. 1 и 2 а) является функция поляризации [3]

$$P(t) = P_0 \left[\frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + \nu_i^2}} e^{-\nu_i t} \cos((\omega_d + \delta)t + \phi - \pi/2) + \frac{\nu_i}{\sqrt{\delta^2 + \nu_i^2}} \cos(\omega_d t + \phi) \right]. \quad (5)$$

Функция (5) была использована для фитирования экспериментальных данных для n-типа кремния при температурах 45 – 55 К. При каждой температуре в рассматриваемом диапазоне на основе (2) было вычислено значение δ (при $A/h = 23.6$ МГц и $\omega_d = 212.22$ рад/мкс). Далее при обработке данные значения параметров ω_d и δ были фиксированы.

Полученные в результате аппроксимации экспериментальных данных значения скорости ионизации АЦ представлены на рис. 3. Как видно из рисунка, при $T = 55$ К скорость ионизации примерно одинакова для всех трех образцов и составляет $\approx 10^6$ с⁻¹. Обратим внимание, что при изменении концентрации фосфора от $1.6 \cdot 10^{13}$ до $2.3 \cdot 10^{15}$ см⁻³ концентрация электронов в зоне проводимости кремния при $T = 55$ К возрастает более чем на порядок (см. [8]). Это означает, что при данной температуре ионизация АЦ определяется захватом электронов не из зоны проводимости, а из валентной зоны. Другими словами, дырка h^+ , связанная на μAl^- , переходит в валентную зону, получив необходимую для этого энергию благодаря взаимодействию с фононами.

Скорость тепловой эмиссии дырок с нейтральных акцепторов определяется известным выражением [9]

$$\nu_i = N_v \sigma_p^- v_{th} \exp(-E_i/k_B T), \quad (6)$$

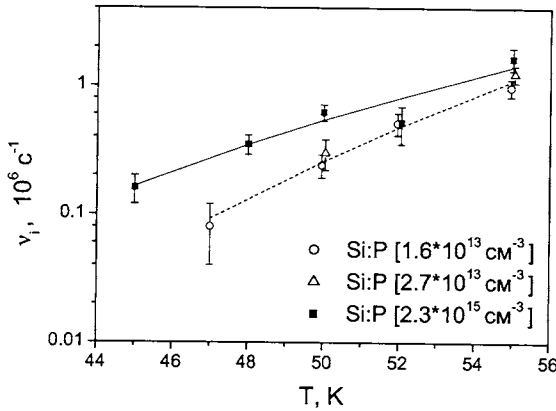


Рис. 3. Температурные зависимости скорости ионизации АЦ μAl в Si, полученные в результате обработки экспериментальных данных для образцов кремния с примесью фосфора с использованием функции поляризации (5). Сплошная и пунктирная линии – зависимости вида $\nu_i \sim T^{-1} \exp(-E_i/k_B T)$ при $E_i = 50$ и 74 мэВ соответственно

где $N_v = 2(m^*k_B T/2\pi\hbar^2)^{3/2}$ – эффективная плотность состояний в валентной зоне; m^* и $v_{th} = \sqrt{3k_B T/m^*}$ – эффективная масса и тепловая скорость дырок; σ_p^- – сечение захвата дырки на отрицательно заряженный АЦ; E_i – энергия ионизации АЦ.

Исходя из (6) оценим скорость тепловой ионизации акцепторной примеси алюминия в кремнии. Воспользуемся расчетными значениями [14] для сечения захвата: $\sigma_p^- [\text{см}^2] \approx 3.8 \cdot 10^{-8} \cdot T^{-3}$ при $2.8 \ll T < 100$ К. При $E_i(\text{Al}) = 68$ мэВ [11] получаем: $\nu_i(\text{Al}) \sim 10^6 \text{ с}^{-1}$ при $T = 55$ К. Таким образом, определенная в настоящей работе скорость ионизации АЦ μAl по порядку величины согласуется с теоретической оценкой скорости тепловой ионизации акцепторного центра Al в Si.

Величина энергии ионизации E_i μAl -акцептора, определенная при описании данных на рис. 3 функцией вида $\nu_i \sim T^{-1} \exp(-E_i/k_B T)$, составила (74 ± 8) и (50 ± 7) мэВ в образцах с концентрацией фосфора $\sim 10^{13}$ и $2.3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ соответственно. Несколько более пологая зависимость $\nu_i(T)$ для образца с более высокой концентрацией примеси фосфора (см. рис. 3), возможно, обусловлена дополнительным вкладом в скорость ионизации акцептора за счет захвата электронов из зоны

проводимости. Отметим, что полученные значения ν_i и E_i могут содержать систематическую ошибку ($\sim 30\%$ и $\sim 5\%$ при определении ν_i и E_i соответственно), связанную с тем, что параметры ω_d и δ при обработке были фиксированы.

В кремнии с примесью атомов бора $1.3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ (см. рис. 2б) отклонение сдвига частоты прецессии спина мюона от закона Кюри наблюдается при более высокой температуре ($T > 80 \text{ К}$), чем в образцах с примесью фосфора. В р-типа кремнии, в отличие от кремния п-типа, помимо тепловой ионизации акцептора (скорость данного процесса для невырожденных образцов кремния не зависит от типа примеси) также высока вероятность обратного процесса – захвата дырки из валентной зоны на μAl^- . Причем при данной концентрации бора в образце скорость захвата $\nu_c = \nu_i \cdot W_0 / (1 - W_0)$ существенно выше скорости ионизации ν_i при $T \lesssim 80 \text{ К}$ ($W_0 \approx 1$ [8]). При $T > 45 \text{ К}$, когда вероятность ионизации μAl^0 за время порядка τ_μ становится существенной, также выполняется условие $\lambda, \delta \ll (\nu_i + \nu_c)$. Решение системы дифференциальных уравнений (1) в этом случае приводит к функции поляризации вида (4) при $\lambda = W_0 \lambda_p$ и $\omega = W_0 \omega_p + W_- \omega_d$. Соответственно, для сдвига частоты прецессии спина мюона получаем

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_d} = \frac{\omega_p - \omega_d}{\omega_d} \cdot W_0. \quad (7)$$

Заселенность W_0 состояния μAl^0 вычислялась как [15]

$$W_0 = \left[1 + \beta^{-1} \exp\left(\frac{F - E_i}{k_B T}\right) \right]^{-1}, \quad (8)$$

где E_i – энергия ионизации акцепторного центра μAl ; β – фактор вырождения ($\beta = 4$); F – энергия Ферми (аналитические выражения для определения положения уровня Ферми приведены, например, в [15]).

Функция (7) была использована для аппроксимации экспериментальных данных, приведенных на рис. 2б. Полученные в результате аппроксимации величина константы сверхтонкого взаимодействия и энергия ионизации АЦ составили соответственно $(25.3 \pm 0.4) \text{ МГц}$ и $(66.0 \pm 3.4) \text{ мэВ}$.

Таким образом, настоящие данные показывают, что как в р-типа кремнии, так и в кремнии п-типа с концентрацией донорной примеси $\lesssim 10^{15} \text{ см}^{-3}$ основным механизмом ионизации акцепторной примеси Al при $T > 45 \text{ К}$ является тепловая ионизация. Скорость тепловой

ионизации АЦ Al в Si изменяется от $\sim 10^5$ до $\sim 10^6$ с⁻¹ в интервале температур 45 – 55 К.

Авторы выражают благодарность дирекции Института Пауля Шеррера (Швейцария) за предоставление возможности проведения настоящих измерений.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 02-02-16881.

Список литературы

- [1] Т.Н.Мамедов, А.В.Стойков, В.Н.Горелкин //ЭЧАЯ 33 (4), 1005 (2002).
- [2] T.N.Mamedov, D.Herlach, V.N.Gorelkin et al. //Physica B 326 (1-4), 97 (2003).
- [3] T.N.Mamedov, I.L.Chaplygin, V.N.Duginov et al. //J.Phys.: Condens. Matter 11, 2849 (1999).
- [4] V.N.Gorelkin, T.N.Mamedov, A.S.Baturin //Physica B 289-290, 585 (2000).
- [5] Г.Л.Бир, Г.Е.Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*. М.: Наука, 1972.
- [6] H.Neubrand //Phys.Stat.Sol. (b) 86, 269 (1978).
- [7] T.Susuki, D.F.Measday, J.P.Roalsvig //Phys. Rev. C 35, 2212 (1987).
- [8] Т.Н.Мамедов, Д.Г.Андреанов, Д.Герлах и др. //Письма в ЖЭТФ 76, 515 (2002).
- [9] А.Милнс. *Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках*. М.: Мир, 1977.
- [10] S.K.Tewksbury //J.Appl.Phys. 53 (5), 3865 (1982).
- [11] *Физические величины*. М.: Энергоатомиздат, 1991.
- [12] E.Rosencher, Y.Mosser, G.Vincent //Phys.Rev. B 29, 1135 (1984).
- [13] R.Abela, C.Baines, X.Donath et al. //Нур. Int. 87, 1105 (1994).
- [14] В.Н.Абакумов, В.И.Перель, И.Н.Яснеевич //ФТП 12, 3 (1978).
- [15] К.В.Шалимова. *Физика полупроводников*. М.: Энергия, 1971.

Мамедов Т. Н. и др.
Исследование механизмов ионизации
акцепторной примеси алюминия в кремнии

P14-2003-201

Настоящая работа направлена на исследование процессов ионизации мелких акцепторных центров (АЦ) в кремнии. Примесные атомы ${}_{\mu}\text{Al}$ в исследуемых образцах кристаллического кремния с примесью фосфора ($1.6 \cdot 10^{13}$, $2.7 \cdot 10^{13}$ и $2.3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$) и бора ($1.3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$) создавались путем имплантации отрицательных мюонов. Поляризация мюонов была исследована в поперечном спину мюона магнитном поле величиной 2,5 кГс в диапазоне температур 10–300 К.

Установлено, что как в *p*-типа кремнии, так и в кремнии *n*-типа с концентрацией примеси $\leq 10^{15} \text{ см}^{-3}$ основным механизмом ионизации акцепторной примеси Al при $T > 45 \text{ К}$ является тепловая ионизация. Скорость тепловой ионизации АЦ Al в Si изменяется от $\sim 10^5$ до $\sim 10^6 \text{ с}^{-1}$ в интервале температур 45–55 К.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем им. В. П. Джеллепова ОИЯИ при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 02-02-16881.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2003

Перевод авторов

Mamedov T. N. et al.
Investigation of the Mechanisms for Ionization
of the Aluminium Acceptor Impurity in Silicon

P14-2003-201

The work is aimed to study the processes of ionization of shallow acceptor centres in silicon. Impurity atoms of ${}_{\mu}\text{Al}$ in crystalline silicon samples with phosphorus ($1.6 \cdot 10^{13}$, $2.7 \cdot 10^{13}$ and $2.3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) and boron ($1.3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) impurities were created via implantation of negative muons. The polarization of muons was studied in a magnetic field of 0.25 T transverse to the direction of the muon spin in the temperature range 10–300 K.

Both in *p*-type silicon and in *n*-type silicon with impurity concentration $\leq 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ the dominant mechanism for ionization of Al acceptor impurity at $T > 45 \text{ K}$ was proved to be thermal ionization. The rate for thermal ionization of aluminium acceptor in silicon varies from $\sim 10^5$ to $\sim 10^6 \text{ s}^{-1}$ in the temperature range 45–55 K.

The investigation has been performed at the Dzhelpev Laboratory of Nuclear Problems, JINR, and supported by the Russian Foundation for Basic Research, Project 02-02-16881.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2003

Редактор *О. Г. Андреева*
Макет *Е. В. Сабеевой*

Подписано в печать 04.11.2003.
Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 0,63. Уч.-изд. л. 0,59. Тираж 285 экз. Заказ № 54170.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.
E-mail: publish@pds.jinr.ru
www.jinr.ru/publish/