

О ПРИРОДЕ А-ПОЛОСЫ (0,97 эв) ЛУМИНЕСЦЕНЦИИ
В ОБЛУЧЕННОМ КРЕМНИИ

В. С. Коноплев, А. А. Гишпрус

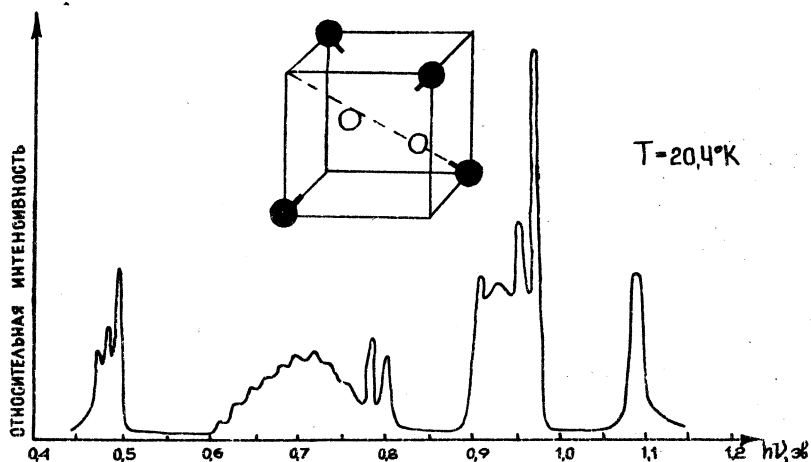
УДК 535.376

В качестве модели центра, связанного с излучением полосы 0,97 эв, предлагается комплекс, состоящий из двух междоузельных атомов С.

Из числа полос, возникающих в спектрах фотолуминесценции кристаллов кремния после облучения быстрыми электронами или γ -квантами, наиболее подробно была исследована так называемая А-полоса (энергия бесфононной линии 0,972 эв; в дальнейшем эту полосу будем называть "полоса 0,97 эв", а центр, связанный с ней, "центр 0,97 эв") рис. I /1,2,3,4/. Первоначально /5/ она была приписана оптическим переходом на А-центре (т.е. ассоциации вакансии с кислородом), однако от этой интерпретации пришлось отказаться после того, как было выяснено, что эта полоса наблюдается вне зависимости от присутствия в кристалле кислорода. Точка зрения авторов работ, опубликованных в последнее время, сводится к тому, что эта полоса возникает в результате внутривалентных излучательных переходов электронов на дивакансии /2,3,4/. Это утверждение основано на следующих аргументах: 1) появление полосы 0,97 эв не коррелирует с наличием в кристаллах основных легируемых примесей - следовательно, она связана с собственными дефектами кристаллической решетки; 2) эта полоса не связана с простейшими дефектами (вакансиями или междоузельями), так как она не наблюдается в кристаллах, облученных при низких температурах, когда миграция дефектов затруднена. Для ее появления требуется в этом случае нагреть кристалл до температуры выше азотной /6/; 3) согласно данным пьезоспектроскопических измерений симметрия центра 0,97 эв относится к моноклинному типу, т.е. к тому же, что и дивакансия /3,7/; 4) резкое уменьшение интенсивности полосы 0,97 эв при отжиге кристаллов происходит примерно

в том же температурном интервале, что и уменьшение концентрации дивакансий (определяемой по величине сигнала ЭПР) /8/.

Однако, имеются факты, заставляющие сомневаться в правильности идентификации полосы 0,97 эв с дивакансией. Как известно,



Р и с.1. Общий вид спектра фотолуминесценции кремния, облученного быстрыми электронами, и модель центра 0,97 эв (● - атом кремния, ○ - атом углерода)

дивакансия вносит в запрещенную зону кремния несколько энергетических уровней, соответствующих различным зарядовым состояниям. В зависимости от положения уровня Ферми дивакансия оказывается в разных зарядовых состояниях, и в спектрах поглощения наблюдаются различные полосы, связанные с внутрицентровыми переходами или с переходами носителей из зон на уровни дивакансии /7,9/. Казалось бы, спектр луминесценции дивакансии должен коррелировать со спектром поглощения и претерпевать при смещении уровня Ферми изменения, подобные тем, которые наблюдаются в спектре поглощения. Между тем, полоса 0,97 эв наблюдается в кристаллах как p-, так и n-типа. Это обстоятельство, по-видимому, свидетельствует о том, что центр 0,97 эв не является многозарядовым. Попутно заметим, что мы провели измерения зависимости интенсивности

ти линии 0,97 эв от возбуждения и установили, что она линейна. Поскольку полоса 0,97 эв возникает в результате внутрицентровых переходов, то непосредственно из спектра люминесценции нельзя определить положение соответствующего энергетического уровня, но отметим, что разность ($E_g - 0,97$) эв, т.е. максимальное (без учета энергии начального состояния) расстояние от основного уровня центра 0,97 эв до одной из зон, меньше глубины любого зарядового состояния дивакансии.

Дополнительными доводами против дивакансии служат данные о дихроизме полосы 0,97 эв и об ее отжиге. Согласно работе /3/ величина дихроизма линии 0,97 эв меньше единицы, в то же время величина дихроизма, определенная из спектров поглощения, связанного с дивакансиями, превышает единицу /7/. Согласно данным работ /7,8/, отжиг дивакансий происходит при температуре $300 + 350^\circ\text{C}$ (в зависимости от содержания кислорода в образцах) тогда как отжиг полосы 0,97 эв наблюдается при температурах $250 + 300^\circ\text{C}$ /2,3/. (Такое отличие, по-видимому, превышает погрешность эксперимента). Мы провели измерения отжига полосы 0,97 эв (используя метод, описанный в /10/) и установили, что полоса 0,97 эв действительно отжигается при температурах $250 + 300^\circ\text{C}$ (в зависимости от содержания кислорода). Кроме того, согласно нашим данным, скорость введения центров 0,97 эв при облучении кремния быстрыми электронами уменьшается при увеличении содержания кислорода в образцах; в то же время скорость введения дивакансий возрастает при увеличении концентрации кислорода /11/. Изложенные соображения, по нашему мнению, не позволяют считать дивакансию ответственной за излучение полосы 0,97 эв.

Из числа возможных моделей центра 0,97 эв, в которые не входят кислород и основные легирующие примеси, следует сразу исключить более сложные вакансионные комплексы, так как они устойчивы при еще более высоких температурах, чем дивакансия /12/. Поэтому нам кажется оправданной попытка построения модели центра 0,97 эв из междоузельных атомов с учетом роли углерода, который, как известно, обычно имеется в кристаллах кремния в концентрациях $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Участие углерода в образовании комплекса, ответственного за полосу 0,97 эв, следует из результатов работы Нымена /13/, который в кристаллах с высоким содержанием углерода и облученных быстрыми электронами наблюдал полосу поглощения при энергии

кванта 0,97 эв, связанную с внутрицентровыми переходами (подобная полоса поглощения наблюдалась и в наших экспериментах); температура отжига этой полосы оказалась близкой к температуре отжига полосы люминесценции 0,97 эв. Известно, что в кремнии атомы углерода первоначально находятся в узлах решетки, но, взаимодействуя с созданными в результате облучения междоузельными атомами кремния, переходят в междоузельные положения, могут мигрировать по кристаллу при температурах $> 100^{\circ}\text{K}$ и участвовать в образовании различных комплексов. Конкретная модель комплекса может быть предложена на основании сведений о симметрии центра 0,97 эв (моноклинный тип /3/) с привлечением данных ЭПР, приведенных в работе Броуэра /14/. В указанной работе, выполненной с применением изотопа C^{13} , центр si G-II идентифицирован с парой атомов углерода, представляющих собой так называемое "расщепленное междоузлие $\langle \text{III} \rangle$ ". Такое "расщепленное междоузлие" образуется, когда подвижный атом углерода захватывается атомом углерода, находящимся в узле решетки. За счет эффекта Яна-Теллера пара атомов углерода оказывается расположенной вдоль оси несколько смещенной от направления $\langle \text{III} \rangle$, в результате чего симметрия центра оказывается не тригональной, а моноклинной. Этот центр отжигается при той же температуре, что и центр 0,97 эв.

Таким образом, сопоставление данных поглощения /13/, ЭПР /14/ и люминесценции позволяет утверждать, что центр 0,97 эв представляет собой расщепленное междоузлие, образованное парой атомов углерода.

Поступила в редакцию
15 июля 1975 г.

Л и т е р а т у р а

1. А. В. Дхневич, В. Д. Ткачев. ФТТ, 7, 3410 (1965).
2. E. S. Johnson, W. D. Compton. Proc. of the Conf. on Rad. Eff. in Semis., Albany (1970) p. 219.
3. А. В. Мудрый. Диссертация (Минск, БГУ, 1975).
4. В. Н. Пеня и др. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 8, 7 (1972).
5. А. В. Дхневич. ФТТ, 7, 323 (1965).

6. В. С. Коноплев, В. М. Коннов и др. ФТП, 8, 9 (1974).
7. L. J. Cheng et al. Phys. Rev., 153, 761 (1966).
8. G. D. Watkins, J. W. Corbett. Phys. Rev., 138, A555 (1965).
9. М. Т. Лаппо и В. Д. Трачев. ФТП, 4, II (1970).
10. В. С. Коноплев, А. А. Гншиус. Краткие сообщения по физике ФИАН. № 9, 33 (1975).
11. H. J. Stein. Proc. of the Conf. on Rad. Eff. in Semic., Albany (1970) p. 128.
12. Y. H. Lee, J. W. Corbett. Phys. Rev., 88, 2850 (1973).
13. A. R. Bean et al. J. Phys. Chem. Sol., 31, 739 (1970).
14. K. V. Brower. Phys. Rev., B9, 2607 (1974).