

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ МЕТОДОМ ЭПР СОБСТВЕННОГО МЕЖДОУЗЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА В КРЕМНИИ

© Г.О.Тожобаев, Ш.М.Махкамов, Ю.В.Горелжинский,  
Н.А.Турсунов, М.А.Магов

Институт ядерной физики Академии наук Узбекистана,  
702132 Ташкент, Узбекистан  
(Поступила в Редакцию 28 июня 1995 г.)

Методом ЭПР исследовано влияние предварительной термообработки кремния и последующего облучения протонами или  $\alpha$ -частицами на образование собственных междоузельных дефектов в монокристаллическом кремнии. Показано, что центр Si-PK4 связан с термостабильным до 770 К комплексом междоузельных атомов кремния. Обнаружено и исследовано сверхтонкое взаимодействие от изотопа  $^{29}\text{Si}$ . Предложена структурная модель дефектного центра Si-PK4, представляющего собой пару  $\langle 001 \rangle$ -расщепленных собственных междоузельных атомов кремния.

Несмотря на большое количество экспериментальных работ по исследованию состояний дефектных центров в кремнии, до сих пор не имеется достаточной информации о собственных междоузельных дефектах. Среди большого числа дефектов, которые идентифицированы по сигналу ЭПР в облученном кремнии, только четыре центра (Si-G25, Si-A5, Si-B3 и Si-P6) связываются с собственными междоузельными комплексами кремния <sup>[1-6]</sup>.

Центр Si-G25, обнаруженный после облучения *n*-типа кремния электронами с энергией 46 MeV при температуре 4.2 К, был отнесен к дефекту с гантельной конфигурацией  $\langle 100 \rangle$ , с отрицательным зарядовым состоянием и температурной стабильностью 170 К <sup>[2]</sup>. Центр Si-A5 авторы <sup>[3]</sup> связывают с комплексом, состоящим из двух эквивалентных собственных междоузельных атомов кремния со спином  $S = 1$ . Этот дефект отжигается при температуре 440 К. Для него была предложена модель двух расщепленных междоузлий, разнесенных на расстояние 9 Å. Центр Si-B3 — вторичный дефект, который формируется при отжиге 500 К в облученном нейтронами кремнии *p*-типа. Авторы <sup>[1,4]</sup> заключили, что спектр Si-B3 соответствует либо  $\langle 001 \rangle$ -двойному, либо  $\langle 001 \rangle$ -расщепленному междоузлию Si, расположенному в тетрапоре. Центр Si-P6 наблюдался в зонном кремнии после облучения нейтронами при комнатной температуре и отжигался или перестраивался

при температуре 440 К [5,6]. Из анализа g- и A-тензоров была предложена модель для дефекта Si-P6 как для положительно заряженного <100>-расщепленного междоузлия кремния.

В настоящей работе представлены экспериментальное исследование влияния предварительной высокотемпературной обработки на формирование собственного междоузельного дефекта в кремнии при облучении высокоэнергетичными заряженными частицами и идентификация их методом ЭПР.

В исследованиях использовался ЭПР-спектрометр восьмимиллиметрового диапазона, температура образца при измерениях была 77 и 300 К. Образцы кремния зонной очистки с  $\rho = 100 \Omega \cdot \text{см}$  облучались на циклотроне протонами или  $\alpha$ -частицами при комнатной температуре с энергиями частиц 30 и 50 MeV соответственно. Плотность тока в пучке при облучении составляла  $\sim 0.3-0.5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$ . Измерения спектра ЭПР показали, что облучение предварительно термообработанного при  $\sim 1270-1370 \text{ K}$  кремния приводит к регулярному появлению сигнала ЭПР центра Si-PK4 даже после облучения сравнительно малыми флюенсами протонов ( $\sim 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ).

Спектр ЭПР, обусловленный центром Si-PK4, обнаружен ранее в зонном кремнии [7] после облучения большими флюенсами быстрых

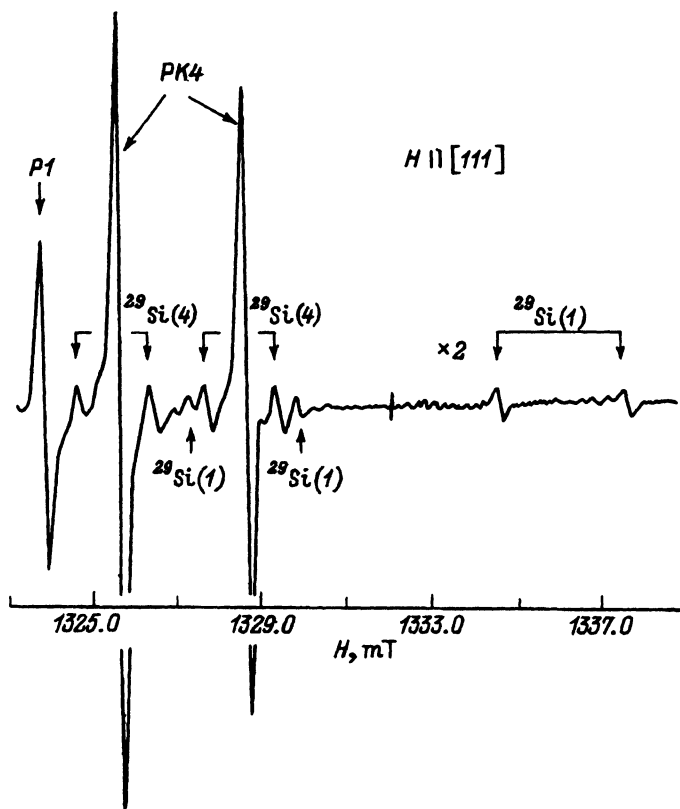


Рис. 1. Спектр ЭПР центра Si-PK4.

Стрелками показаны СТС от изотопа  $^{29}\text{Si}$ .  $\gamma_0 = 37.104 \text{ GHz}$ ;  $T = 300 \text{ K}$ .

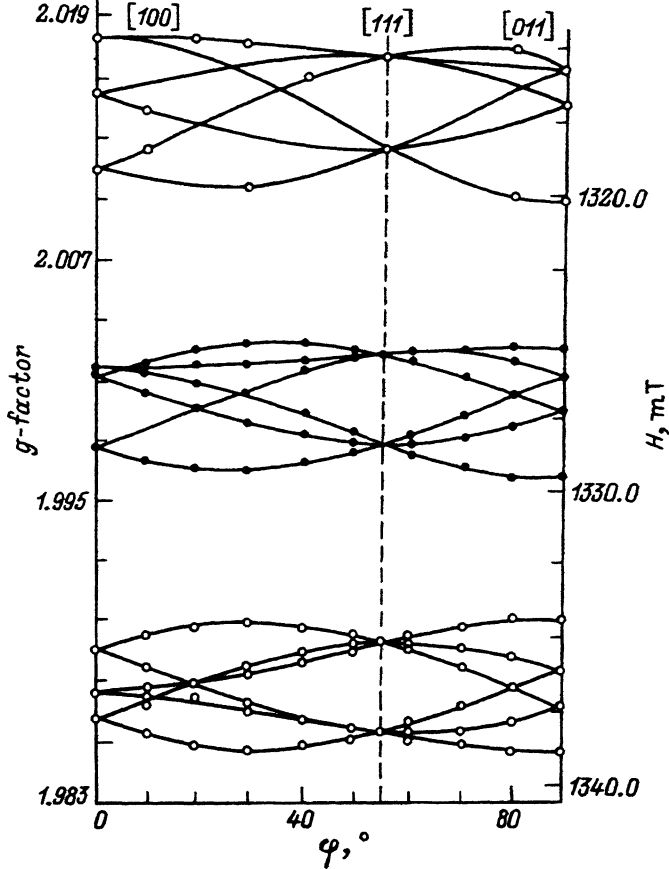


Рис. 2. Угловая зависимость спектра Si-PK4.

Точки — эксперимент, линии — результаты вычислений с использованием констант  $g$ - и  $A$ -тензоров из таблицы.

нейтронов ( $\sim 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ ). Дефект, ответственный за этот спектр ЭПР, со спином  $S = 1/2$  имеет симметрию  $C_2$ , формируется после отжига образцов кремния при  $\sim 470 \text{ K}$  и проявляет стабильность до  $780 \text{ K}$ . Однако природа этого центра до сих пор оставалась неизвестной, поскольку его появление было нерегулярным в ряде кристаллов зонного кремния [7]. К тому же в работах [1,3,8] при тех же условиях облучения и отжига этот дефект не регистрировался. В данной работе путем варьирования режима термообработки и флюенса облучения удалось оптимизировать интенсивность сигналов этого центра и выделить в спектре ЭПР сверхтонкие сателлиты (СТС) от изотопа  $^{29}\text{Si}$ . Кинетики формирования центра Si-PK4 в облученных протонами или  $\alpha$ -частицами образцах очень близки, а в образцах кремния, выращенных по Чохральскому, центр Si-PK4 не наблюдался независимо от условий предварительной термообработки и типа легирующей примеси.

Спектр Si-PK4 с компонентами СТС при  $300 \text{ K}$  приведен на рис. 1. Как видно из этого рисунка, в спектре наблюдаются интенсивная цен-

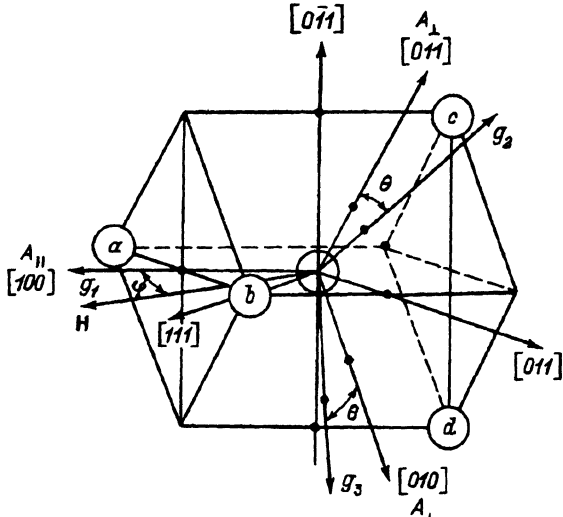


Рис. 3. Направления осей  $g$ - и  $A$ -тензоров для одной из эквивалентных ориентаций дефекта.

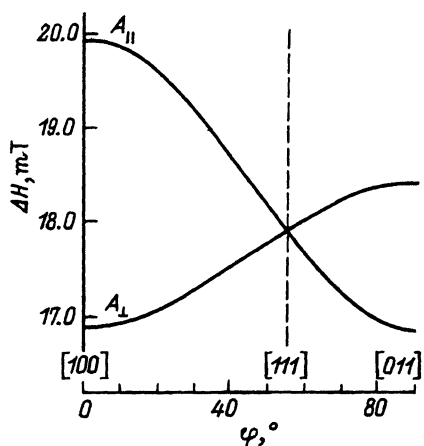


Рис. 4. Угловая зависимость сил для одного СТВ от одного атома  $^{29}\text{Si}$ .

тральная группа линий и более слабые сателлиты, обусловленные СТС от  $^{29}\text{Si}$ , природное содержание которого составляет 4.7%. Этот спектр связывается с анизотропным дефектом, который имеет несколько эквивалентных ориентаций в кубической решетке кремния со спиновым гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \mu_B \mathbf{H} \mathbf{g} \mathbf{S} + \sum_j \mathbf{I}_j \mathbf{A}_j \mathbf{S}_j, \quad (1)$$

где  $\mu_B$  — магнетон Бора,  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{I}$  — спин электрона и ядра данного дефектного атома соответственно,  $\mathbf{H}$  — внешнее магнитное поле,  $\mathbf{g}$  и  $\mathbf{A}$  — симметричные тензоры второго ранга. Первый член описывает положение центральных линий, которые в зависимости от ориентации магнитного поля приведены на рис. 2. Второй член в (1) отражает сверхтонкое взаимодействие ядер соседних атомов с дефектом.

На основе экспериментально полученных ЭПР-спектров были выполнены измерения компонент  $\mathbf{A}$ - и  $\mathbf{g}$ -тензоров в системе кубических осей с последующей диагонализацией  $\mathbf{g}$ -тензора. Из угловой зависимости СТС определены главные значения  $\mathbf{A}$ - и  $\mathbf{g}$ -тензоров, которые приводятся в таблице и на рис. 3.

Анализ СТС от  $^{29}\text{Si}$  (рис. 1, 2) показал, что существуют три группы линий, отношение интенсивностей которых к амплитуде центральной группы линий равно  $\sim 2.4\%$  и  $10\%$ , что свидетельствует о принадлежности этих сателлитов одному и четырем эквивалентным атомам кремния соответственно. Причем существуют два атома кремния в узловых положениях, вызывающих СТС от одного и того же атома  $^{29}\text{Si}$  — сильное и слабое расщепление (рис. 1). Здесь важно отметить, что тензор сильного сверхтонкого взаимодействия (СТВ) от  $^{29}\text{Si}$ , которому принадлежит основная часть волновой функции (ВФ) парамагнитного

$g$ -тензор ( $\pm 0.0002$ )	$A$ -тензор ( $\pm 0.5$ МГц)			$\alpha_j^2$	$\beta_j^2$	$\eta_j^2$	$\sum \eta_j^2$
	$^{29}\text{Si}$	$A_{\parallel}$	$A_{\perp}$				
$g_1 = 2.0017$							
$g_2 = 2.0032$	(1)	557.7	471.2	0.30	0.70	0.41	0.41
$g_3 = 1.9957$	(1)	82.7	70.0	0.31	0.69	0.06	0.06
$\theta = 31.2^\circ$	(4)	53.1	44.9	0.32	0.68	0.04	0.16

центра, имеет строго тетрагональную симметрию  $A$ -тензора (рис. 4), т. е.  $A$ -тензор аксиально-симметричен относительно оси  $\langle 001 \rangle$ .

Так же как это было сделано для других дефектов в кремнии [9], мы провели анализ  $A$ -тензоров СТВ в рамках одноэлектронной ВФ неспаренного электрона, которая представляется в виде линейной комбинации  $3z3p$ -атомных орбиталей, локализованных на атомных узлах, входящих в структуру дефекта:

$$\psi_j = \sum \eta_j (\alpha_j \varphi_{3s}^j + \beta_j \varphi_{3p}^j). \quad (2)$$

Здесь  $\eta_j^2$  представляет вклад в СТВ  $j$ -го узла и нормируется как  $\alpha_j^2 + \beta_j^2 = 1$ , где  $\alpha_j^2$  и  $\beta_j^2$  отражают относительные веса  $s$ - и  $p$ -составляющих этой орбитали.

Главные значения аксиально-симметричного  $A$ -тензора задаются следующим образом:

$$\begin{aligned} A_{\parallel}(j) &= a_j + 2b_j, \\ A_{\perp}(j) &= a_j + b_j \end{aligned} \quad (3)$$

с изотропным вкладом СТВ

$$a_j = \frac{16}{3} \Pi (\mu_j / I_j) \mu_B \alpha_j^2 \eta_j^2 \left| \varphi_{3s}(0) \right|_j^2 \quad (4)$$

и с анизотропным вкладом СТВ

$$b_j = \frac{4}{5} (\mu_j / I_j) \mu_B \beta_j^2 \eta_j^2 \langle r_{3p}^{-3} \rangle_j. \quad (5)$$

Здесь  $\mu_j$  и  $\mu_B$  — электронный и ядерный магнитные моменты соответственно,  $I_j$  — эффективный спин ядра,  $r$  — радиус-вектор электрона относительно ядра. Используя значения  $\langle r_{3p}^{-3} \rangle = 16.1 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$  и  $|\varphi_{3s}(0)|^2 = 31.5 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$  для кремния [9], находим, что 41 % ВФ парамагнитного электрона принадлежит одному атому кремния и только 16 % четырем эквивалентным атомам кремния (см. таблицу), что характерно для дефектов междоузельного типа [9]. ВФ парамагнитного электрона состоит из 30 %  $3s$ - и 70 %  $3p$ -состояний, демонстрируя большой вклад  $s$ -состояния, что не свойственно для дефектов вакансионной природы.

Используя метод, предложенный Ли и Корбетом [10], и учитывая наличие сдвига  $g$ -тензора от  $g_0$ , можно предположить, что центр Si- $PK4$  соответствует дефекту в положительном зарядовом состоянии. Ширина линии центра Si- $PK4$  при 77 и 300 К равна 1.5 Г. Величины, как и направления, главных значений  $A$ - и  $g$ -тензоров меняются очень слабо в указанном диапазоне температур, а симметрия дефекта сохраняется. Но этот факт не исключает того, что  $C_2$ -симметрия  $g$ -тензора дефекта возникает из-за ян-теллеровского искажения, в то время как ось  $A$ -тензора сохраняет  $\langle 001 \rangle$ -аксиальную симметрию. Отсутствие в дефекте Si- $PK4$  СТВ с осью симметрии, близкой к  $\langle 111 \rangle$ , позволяет уверенно исключить вакансионную природу этого дефекта, а его высокая температурная стабильность (до  $\sim 770$  К) свидетельствует о том, что этот дефект соответствует комплексу междоузельных атомов кремния.

На основе полученных экспериментальных данных можно предположить, что структура исследуемого центра Si- $PK4$  представляет собой пару  $\langle 001 \rangle$ -расщепленных собственных междоузельных атомов (типа Si- $P6$ ). Возможность существования такой конфигурации недавно была предсказана в теоретической работе [11], посвященной природе междоузельных дефектов в кремнии.

### Список литературы

- [1] Brower K.L. Phys. Rev. **B14**, 3, 872 (1976).
- [2] Watkins G.D. In: Lattice Defects in Semiconductors Ed. F.A. Huntley Inst. of Phys., London (1974). P. 1.
- [3] Lee Y.H., Kim Y.M., Corbett J.W. Rad. Eff. **15**, 77 (1972).
- [4] Daly D.F. J. Appl. Phys. **42**, 864 (1971).
- [5] Lee Y.H., Corbett J.W. Solid State. Commun. **15**, 1781 (1974).
- [6] Lee Y.H., Gerasimenko N.N., Corbett J.W. Phys. Rev. **B14**, 10, 4506 (1976).
- [7] Mu E., Wao J.C., Wu S.X., Yan M.X., Qin G.G. Phys. Lett. **A118**, 7, 347 (1986).
- [8] Lee Y.H., Brosious P.R., Corbett J.W. Rad. Eff. **22**, 169 (1974).
- [9] Lee Y.H., Corbett J.W. Phys. Rev. **134**, 1359 (1964).
- [10] Lee Y.H., Corbett J.W. Phys. Rev. **B8**, 6, 2810 (1973).
- [11] Myakenkaya G.S., Gutsev G.L., Gerasimenko N.N., Frolov V.V., Chubisov M.A., Corbett J.W. Rad. Eff. and Defects in Sol. **129**, 199 (1994).