

# Дислокационная фотолюминесценция в кристаллах кремния с различным примесным составом

© С.А. Шевченко, А.Н. Изотов

Институт физики твердого тела Российской академии наук,  
142432 Черногловка, Московская обл., Россия

(Поступила в Редакцию 14 мая 2002 г.)

В кристаллах кремния с различным примесным составом, деформированных пластически при температурах выше  $1000^\circ\text{C}$ , определена специфика влияния кислорода на спектры дислокационной фотолюминесценции (ДФЛ) при 4.2 К. Обнаружено сильное влияние типа легирующей примеси на спектры ДФЛ при концентрациях выше  $10^{16}\text{ cm}^{-3}$ . Показано, что особенности многих спектров ДФЛ в кремнии могут быть объяснены в предположении, что линии D1 и D2 связаны с дислокационными ступеньками краевого типа на скользящих дислокациях.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 00-15-96703 и 02-02-17024).

Дислокационная фотолюминесценция (ДФЛ) в кремнии при 4.2 К характеризуется линиями D1 (0.807 eV), D2 (0.870 eV), D3 (0.935 eV) и D4 (1.00 eV) [1]. Линия D4 и линия D3 (фононное ТО повторение линии D4) связываются с излучением регулярных сегментов расщепленных  $60^\circ$  дислокаций [2–4]. Интерес к природе линий D1 и D2, которая не выяснена окончательно, обусловлен показанной в [4] возможностью использования этого излучения в оптоэлектронике.

Известно, что линии D1 и D2 наблюдаются в кристаллах кремния, которые деформировались пластически при температурах  $T < 900^\circ\text{C}$ , а затем отжигались в интервале температур  $400\text{--}1200^\circ\text{C}$ . Анализ условий появления или исчезновения этих линий в [2,5–10] указывает на возможную их связь с местами нарушения трансляционной симметрии на дислокациях, т.е. со специфическими дефектами типа ступенек и дислокационных узлов.

В другой стороны, весьма интенсивные линии D1 и D2 регистрируются в исходных кристаллах кремния, выращенных методом Чохральского (Cz Si), после отжига, способствующих зарождению и росту кислородных преципитатов [11–13]. Преципитация кислорода сопровождается генерацией межузельных атомов  $\text{Si}_i$  и образованием дислокационных петель внедренного типа, плоскость которых перпендикулярна вектору Бюргерса  $\mathbf{b}$ : петель частичных дислокаций Франка ( $\mathbf{b} = a/3\langle 111 \rangle$ ,  $a$  — постоянная решетки) и петель полных призматических дислокаций ( $\mathbf{b} = a/2\langle 110 \rangle$ ). При поглощении избыточных атомов  $\text{Si}_i$  эти дислокации переползают путем образования и перемещения краевых ступенек в плоскости петли [14]. Линии D1 и D2, регистрируемые в рекристаллизованных слоях (100) Si после отжига при  $1100^\circ\text{C}$  в хлорсодержащей атмосфере, связываются с трехмерной сеткой чисто краевых дислокаций [15]. Изменение дефектной структуры этих слоев при отжиге обусловлено расширением полных призматических петель вследствие переползания и упругим взаимодействием сближающихся больших петель.

Исследования методом просвечивающей электронной микроскопии показали, что в кремнии указанные дислокационные петли являются эффективными геттерами переходных металлов [16–18]. В кристаллах кремния, выращенных методом бестигельной зонной плавки (FZ Si) и преднамеренно загрязненных медью, обнаружены колонии преципитатов меди на площади, обметенной геликоидальными дислокациями [16,17], которые образуются из винтовых скользящих дислокаций с краевыми ступеньками вследствие переползания последних [14]. Этот факт и дискретное расположение преципитатов меди на частичных дислокациях Франка [17] позволяют рассматривать краевые ступеньки как дефекты, способствующие зарождению преципитатов меди. Согласно [18–20], при температурах выше  $900^\circ\text{C}$  кислородные преципитаты в виде многогранников  $\text{SiO}_x$  ( $1 < x < 2$ ) формируются в некоторых местах на дислокациях и в узлах дислокационной сетки.

На основании изложенного выше возникает следующее предположение: в пластически деформированных кристаллах линии D1 и D2 связаны со ступеньками краевого типа на скользящих дислокациях и с дислокационными узлами, т.е. с дефектами, вблизи которых зарождаются преципитаты различных примесей. Максимальное уменьшение концентрации атомов межузельного кислорода в результате преципитации происходит при  $1050^\circ\text{C}$  [21], и в этой области температур влияние кислорода на спектр ДФЛ может быть наиболее заметным. Для проверки этой гипотезы исследовались спектры ДФЛ в кристаллах кремния с различным содержанием кислорода и легирующих примесей, которые деформировались при  $T > 1000^\circ\text{C}$ .

## 1. Методика эксперимента

Исследования проводились на монокристаллах кремния, легированных бором ( $p$ -тип) или фосфором ( $n$ -тип), с различным содержанием кислорода и плотностью

ростовых дислокаций не более  $100 \text{ cm}^{-2}$ . Концентрация бора  $N_B$  и фосфора  $N_P$  изменялась в интервалах  $10^{12} < N_B < 1.6 \cdot 10^{16}$  и  $6 \cdot 10^{13} < N_P < 8 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . В кристаллах FZ и Cz Si концентрация кислорода составляла  $\sim 1 \cdot 10^{17}$  и  $\sim 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  соответственно. В кристаллах с  $N_B, N_P > 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  концентрация углерода составляет  $\sim 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Эти данные получены из спектров поглощения в инфракрасной области. Химически полированные параллелепипеды размером  $3.2 \times 3.4 \times 11 \text{ mm}$  деформировались в вакууме  $\sim 7 \text{ Pa}$  сжатием вдоль самого длинного ребра (направление (123)) при различных температурах в интервале  $1050 \leq T_d \leq 1200^\circ\text{C}$  до степеней деформации  $0.5 < \delta < 30\%$  [6]. После окончания деформации кристаллы разгружались и медленно (со скоростью менее  $10^\circ/\text{min}$ ) охлаждались до комнатной температуры, что способствовало получению с равновесной дислокационной структурой. Плотность дислокаций определялась по ямкам травления на грани {111}.

Дислокационная структура, которая формируется при высокотемпературной деформации, исследовалась нами ранее в [6]. Она определяется не только движением дислокаций в плоскости скольжения, но и выходом из этой плоскости вследствие поперечного скольжения винтовых и переползания краевых сегментов. В кристаллах с указанной ориентацией при небольших деформирующих напряжениях  $\tau$  работает одна система скольжения и часть изолированных дислокаций представляет собой прямолинейные (регулярные) сегменты винтовых или  $60^\circ$  дислокаций, которые разделены перегибами и ступеньками. Активизация других систем скольжения при более высоких значениях  $\tau$  и взаимодействие дислокаций способствуют формированию ячеистой структуры и появлению дислокационных узлов. При  $\delta > 20\%$  регулярные сегменты  $60^\circ$  и винтовых дислокаций образуют сетку, степень связности которой увеличивается с  $\delta$ .

Спектры ФЛ измерялись при 4.2 K в диапазоне энергий 0.8–1.2 eV по методике, использованной ранее в [5–7,10]. Плотность мощности возбуждения неравновесных электронов и дырок на длине волны 488.8 nm аргонового лазера составляла  $2 \text{ mW/cm}^2$ .

## 2. Результаты эксперимента

Согласно [7], в кристаллах FZ и Cz Si *p*-типа с  $N_B = 4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , деформированных при  $1050^\circ\text{C}$ , при относительно небольших ( $N_D < 2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$ ) плотностях введенных дислокаций вид спектров ДФЛ существенно отличается. Далее приведены спектры ДФЛ в кристаллах FZ и Cz Si с различными типом и концентрацией легирующей примеси после деформации при  $T \geq 1050^\circ\text{C}$ . Оказалось, что подобное различие спектров ДФЛ имеет место также для кристаллов FZ и Cz Si *n*-типа с  $N_P \leq 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ . В образце FZ *n*-Si (кривая 1 на рис. 1,  $N_P = 6 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ) регистрируется типичный спектр ДФЛ, в котором присутствуют ли-

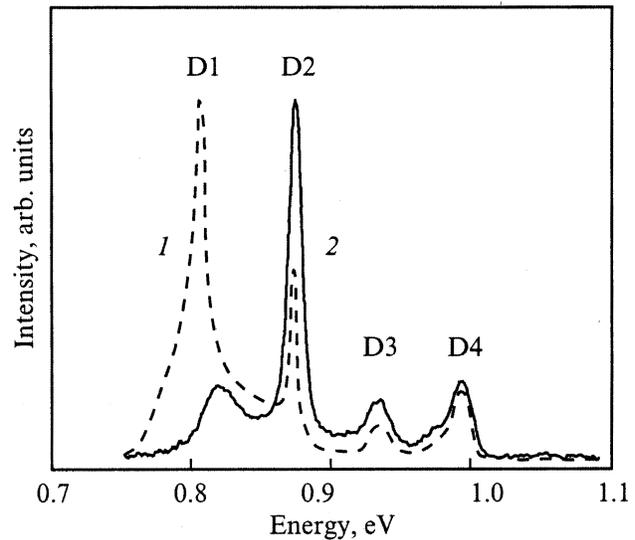


Рис. 1. Спектры ДФЛ при 4.2 K в кристаллах FZ *n*-Si ( $N_P = 6 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ) (1) и Cz *n*-Si ( $N_P = 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) (2). Плотность дислокаций  $N_D, \text{ cm}^{-2}$ :  $4 \cdot 10^6$  (1);  $6 \cdot 10^6$  (2).  $T_d = 1050^\circ\text{C}$ .

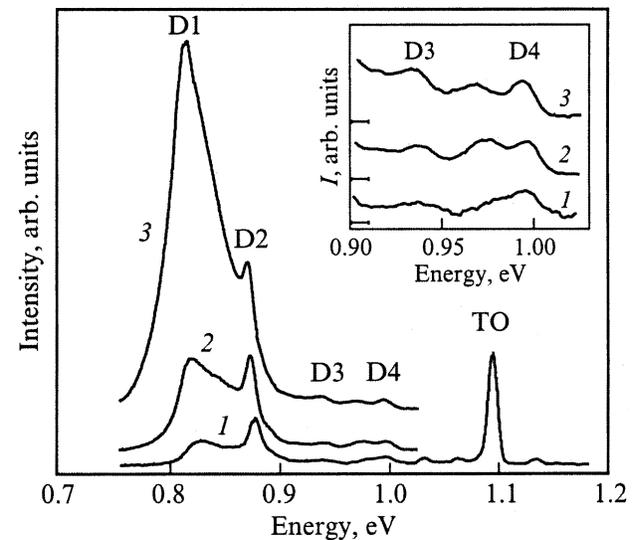


Рис. 2. Спектры ДФЛ при 4.2 K в кристаллах Cz *p*-Si ( $N_B = 1.6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) с различной плотностью дислокаций  $N_D \text{ cm}^{-2}$ :  $8 \cdot 10^6$  (1);  $> 2 \cdot 10^7$  (2);  $\sim 10^9$  (3).  $T_d = 1170^\circ\text{C}$ .

нии D1, D2, D3 и D4, связываемые с дислокациями. В образце Cz *n*-Si (кривая 2,  $N_P = 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) вместо линии D1 появляется уширенная линия с энергией в максимуме  $E_m = 0.82 \text{ eV}$ , который смещается к значению  $E_m = 0.83 \text{ eV}$  при  $N_D \sim 1.5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$ . Специфический спектр ДФЛ наблюдается в образцах Cz Si *n*- и *p*-типов с концентрацией доноров  $N_P \leq 2 \cdot 10^{15}$  и акцепторов  $N_B \leq 1.6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  соответственно, деформированных в интервале температур  $1050 \leq T_d \leq 1200^\circ\text{C}$ .

В кристаллах Cz *p*-Si с  $N_B = 1.6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  ( $T_d = 1170^\circ\text{C}$ ) изучено влияние плотности дислокаций на спектры ФЛ (рис. 2). Как и в [7], при  $N_D < 2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$  увеличение плотности дислокаций способствует возрастанию ФЛ в окрестности линий D1 и D2. Однако при  $N_D > 2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$  появляется излучение с энергией  $E_m = 0.807 \text{ eV}$ , соответствующей линии D1, и с ростом  $N_D$  его интенсивность возрастает значительно быстрее, чем интенсивность линии D2. Поэтому при  $N_D \sim 10^8 - 10^9 \text{ cm}^{-2}$  в спектрах ФЛ доминирует широкая линия D1 (кривая 3,  $N_D \sim 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ). В образцах 1–3 обнаружено возрастание интенсивности излучения с энергиями 0.95–0.97 eV (вставка на рис. 2), которое часто наблюдалось в виде небольшого уступа на длинноволновом крыле линии D4 (см., например, рис. 1).

На рис. 3 представлены ДФЛ спектры в кристаллах Cz *n*-Si, легированных фосфором ( $N_P = 2.6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T_d = 1170^\circ\text{C}$ ). В образцах с  $N_D \sim 10^7 \text{ cm}^{-2}$  регистрируются весьма слабые пики на месте линий D2, D3 и D4 (кривая 1). Дальнейшее увеличение  $N_D$  способствует росту интенсивности линий D1–D4. Широкая полоса излучения слева от линии D2 (кривая 2 на рис. 3) свидетельствует о том, что в образцах с  $N_D \sim 10^8 \text{ cm}^{-2}$  присутствует излучение с  $E_m = 0.807$  и  $0.830 \text{ eV}$  примерно равной интенсивности. В образце с  $\delta = 25\%$  (кривая 3 на рис. 3) излучение в окрестности линии D1 становится доминирующим, но его интегральная интенсивность ( $I_{D1}$ ), приведенная к одинаковым условиям измерения, оказалась в десятки раз ниже, чем в образце 3 (рис. 2).

Поскольку в исходных кристаллах Cz Si *n*- и *p*-типов с  $N_B, N_P > 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  концентрации кислорода и углерода практически одинаковы, значительное ослабление излучения в окрестности линий D1 и D2 в образцах Cz *n*-Si могло быть связанным с влиянием типа легирующей

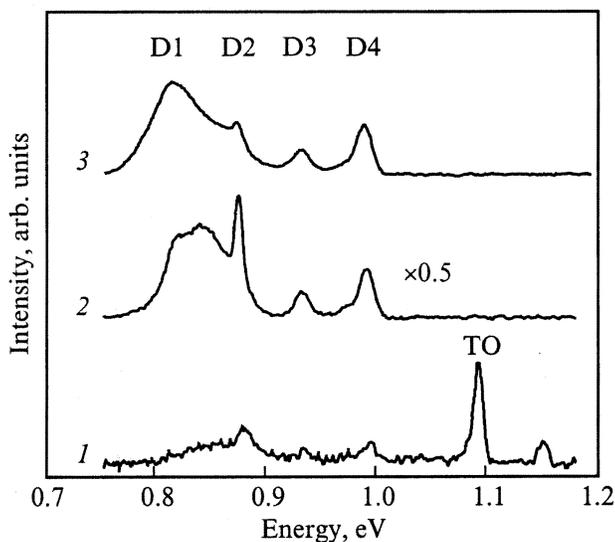


Рис. 3. Спектры ДФЛ при 4.2К в кристаллах Cz *n*-Si ( $N_P = 2.6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) с различной плотностью дислокаций  $N_D, \text{ cm}^{-2}$ :  $1.2 \cdot 10^7$  (1);  $\sim 10^8$  (2);  $\sim 10^9$  (3).  $T_d = 1170^\circ\text{C}$ .

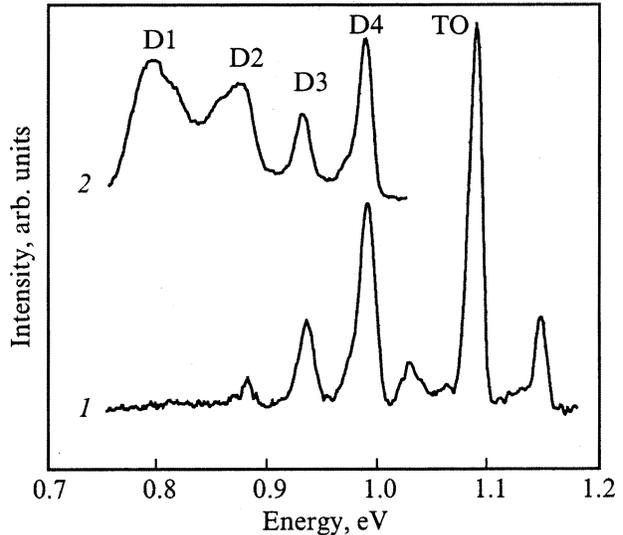


Рис. 4. Спектры ДФЛ при 4.2К в кристаллах FZ *n*-Si ( $N_P = 8 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ) с различной плотностью дислокаций  $N_D, \text{ cm}^{-2}$ :  $1.5 \cdot 10^7$  (1);  $\sim 10^9$  (2).  $T_d = 1050^\circ\text{C}$ .

примеси. Поэтому спектры ДФЛ изучались также в кристаллах Fz *n*-Si с  $N_P = 8 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . В образце с  $N_D = 3 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-2}$  дислокационная ФЛ не регистрируется. Очень слабая линия D2 и весьма интенсивные линии D3 и D4 наблюдаются при  $N_D = 1.5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$  (кривая 1 на рис. 4). Отжиг образца при  $T_0 = 700 - 800^\circ\text{C}$  в течение 30 min не влияет на спектр. При более высоких значениях  $N_D$  появляется излучение в окрестности линий D1 и D2 (кривая 2), но значения  $I_{D1}$  также в десятки раз слабее по сравнению с образцом 3 (рис. 2).

Отметим, что в образцах с разным содержанием кислорода (рис. 2–4) при увеличении  $N_D$  от  $10^7$  до  $10^9 \text{ cm}^{-2}$  величины  $I_{D4}$  отличаются не сильно (в несколько раз). Поэтому сравнимые значения  $I_{D1}$  и  $I_{D4}$  в образцах с  $\delta > 20\%$  (рис. 3 и 4) отражают уменьшение эффективности излучения в окрестности линии D1.

В образцах FZ и Cz Si с  $N_B, N_P > 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  и  $N_D \leq 1.5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$  (рис. 2–4) при  $E > 1 \text{ eV}$  регистрируется излучение ТО экситона, его фонного повторения и ТА экситона [10].

Таким образом, представленные результаты свидетельствуют о специфических изменениях спектров ДФЛ при увеличении концентрации кислорода, бора и фосфора.

### 3. Обсуждение

3.1. Спектры ДФЛ при энергиях  $E < 0.9 \text{ eV}$ . Сравнительное исследование спектров ДФЛ в кристаллах FZ и Cz Si, проведенное нами ранее [7] и в настоящей работе, позволяет определить уширенную линию с  $E_m = 0.82 - 0.83 \text{ eV}$  как характерный признак деформированных кристаллов Cz Si с  $N_D < 2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$ .

Линия D1 появляется в спектре ДФЛ после отжига этих кристаллов при  $1070^\circ\text{C}$  в течение  $t_0 = 30 \text{ min}$  с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры [7] или при введении большого числа дислокаций ( $N_D = 2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-2}$ , рис. 2). Эти факты коррелируют с результатами других исследований. Линия D1 сдвигается в сторону больших энергий при одноосной упругой деформации образцов с введенными дислокациями [22] или после их отжига в кислороде при  $750^\circ\text{C}$  [23]. В деформированных при  $900^\circ\text{C}$  образцах Cz *n*-Si ( $N_d = 2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ,  $N_D \sim 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ) излучение в окрестности линии D1 зависит от скорости их охлаждения после отжига при  $1200^\circ\text{C}$  [24]. При медленном охлаждении вместо линии D1 появляется излучение в виде широкого уступа, примыкающее к длинноволновому крылу линии D2 и быстро спадающее при  $E < 0.82 \text{ eV}$ , а после закалки регистрируются линии D1 и D2 примерно равной интенсивности. Широкая полоса с максимумом при  $E \approx 0.82 \text{ eV}$  и линии D2–D4 наблюдаются после быстрой ( $t_d = 15 \text{ min}$ ,  $N_D = 5 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-2}$ ) деформации образцов Cz Si при  $700^\circ\text{C}$  [9], а при  $t_d = 14 \text{ hours}$  ДФЛ полностью исчезает.

Совокупность этих факторов указывает на процесс преципитации кислорода в кристаллах Cz Si как на возможную причину сильного влияния условий приготовления образцов на излучение в окрестности линии D1.

Мы полагаем, что при медленном охлаждении образцов Cz *n*- и *p*-Si (рис. 1 и 2) после деформации атомы межзельного кислорода преципитируют на имеющихся ростовых преципитатах и вблизи дислокационных ступенек. Из-за несовпадения молярных объемов матрицы и преципитата появляются упругие напряжения, величина которых максимальна для плоского преципитата и уменьшается на порядок на расстоянии  $\sim 10^{-5} \text{ cm}$  [11]. Характер влияния упругих напряжений на положение линии D1 [22,23] позволяет связать появление излучения с  $E_m = 0.82\text{--}0.83 \text{ eV}$  (рис. 1 и 2, а также [9,24]) с присутствием ступенек, ответственных за линию D1, вблизи преципитатов.

Появление линии D1 в деформированных образцах Cz Si после отжига при  $1070^\circ\text{C}$  [7] обусловлено, вероятно, удалением ступенек от преципитатов вследствие переползания дислокаций при поглощении межзельных атомов кремния, которые генерируются при росте преципитатов. Отрыв  $60^\circ$  дислокаций от кислородных преципитатов путем переползания наблюдался в кристаллах Cz Si при  $900^\circ\text{C}$  [20]. В исходных кристаллах Cz Si преобразование линии с  $E_m = 0.818 \text{ eV}$  в линию D1 ( $E_m = 0.807 \text{ eV}$ ) после длительного отжига коррелирует с удалением дислокационных петель от преципитатов [13], а возгорание линии D1 в [24] после отжига при  $1200^\circ\text{C}$  и последующей закалки — с растворением преципитатов [21].

С ростом  $N_D$  число ступенек возрастает вследствие преодоления движущимися дислокациями препятствий в виде атомов примесей, преципитатов и дислокаций

леса, а также их генерации при формировании дислокационных узлов [14]. Согласно [6], в пластически сильно ( $\delta \sim 20\text{--}30\%$ ) деформированных образцах расстояние между узлами в дислокационных сетках составляет  $50\text{--}500 \text{ nm}$ . Полагая, что количество ступенек превышает число узлов, для среднего расстояния между ступеньками возьмем значение  $50 \text{ nm}$ . Тогда при плотности дислокаций  $N_D \sim 10^9 \text{ cm}^{-2}$  получим концентрацию ступенек  $\sim 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , что на порядок превышает максимально возможную концентрацию зародышей преципитатов в кристаллах Cz Si с  $N_O \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  [25]. При заданной температуре  $T_0$  эта концентрация определяется временем отжига, при котором длина диффузии кислорода становится сравнимой со средним расстоянием между преципитатами. В этом случае более вероятен рост существующих, а не образование зародышей новых преципитатов, т.е. при увеличении  $N_D$  возрастает число ступенек, вблизи которых преципитаты не образуются. Поэтому при  $N_D > 10^7 \text{ cm}^{-2}$  в спектре ДФЛ появляется линия D1 и ее интенсивность увеличивается с ростом  $\delta$  (рис. 2).

Чувствительность линии D1 к кислороду, минимальный энергетический барьер для образования преципитата меди на полных призматических дислокациях [17] и образование геликоидальных дислокаций в процессе преципитации кислорода в кремнии [20] означают, что краевые ступеньки, связанные с линией D1, могли бы быть локализованы на винтовых дислокациях. Линию D2 можно связать со ступеньками краевого типа на  $60^\circ$  дислокации. Регулярные сегменты винтовой дислокации расщеплены на две  $30^\circ$  частичные дислокации, а  $60^\circ$  — на  $30^\circ$  и  $90^\circ$  частичные дислокации. Разорванные связи обеих частичных дислокаций реконструированы (замкнуты попарно) и не создают глубоких состояний в запрещенной зоне кремния. С деформационным потенциалом  $90^\circ$  частичных дислокаций связываются две квазиодномерные зоны, отщепленные от зоны проводимости (пустая зона  $E_{Dc}$ ) и от валентной зоны (заполненная зона  $E_{Dv}$ ), на расстоянии  $\sim 0.07 \text{ eV}$  от краев соответствующих зон. Поэтому глубокие состояния, связанные с краевыми ступеньками или дислокационными узлами и проявляющиеся в ФЛ, могут быть обусловлены присутствием атома кремния с ненасыщенной связью.

Значительное уменьшение интенсивности ФЛ в окрестности линии D1 и D2 в деформированных образцах Cz и FZ *n*-Si при  $N_P > 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  (рис. 3 и 4) по сравнению с образцами Cz *p*-Si (рис. 2) коррелирует с подавлением преципитации кислорода в Cz *n*-Si при сильном легировании примесями V группы (в отличие от легирования бором) [26], а также с различным влиянием бора и фосфора на подвижность дислокаций Si [27]. Проблема взаимодействия технологических примесей (азота, кислорода и углерода) и некоторых легирующих примесей III и V групп с ядром  $90^\circ$  частичной дислокации в кремнии исследовалась теоретически в [28]. Тормозящее действие кислорода на движение дислокаций связывается с ускоренной диффузией атомов меж-

узелного кислорода  $O_i$  вдоль ядер этих дислокаций и образованием стабильного комплекса из двух атомов  $O_i$ , который расположен в области растяжения. В отличие от кислорода, примеси As, В, N и P взаимодействуют химически с ядром  $90^\circ$  частичной дислокации, разрушая реконструированные связи, и с дефектом реконструкции этого ядра (солитоном). Солитон — это изолированный атом Si с тремя насыщенными и одной ненасыщенной связью, который находится на границе между реконструированными регулярными сегментами частичных дислокаций с разной фазой. Поэтому в ядре частичных дислокаций атом фосфора, например, может замещать атом Si с четырьмя (а) или с тремя (б) насыщенными связями (при взаимодействии с солитоном). В случае (а) в запрещенной зоне имеются мелкий донорный уровень фосфора и глубокий уровень солитона, а в случае (б) остается только мелкий уровень вблизи потолка валентной зоны или в валентной зоне, связанный с парой оставшихся валентных электронов фосфора, т.е. имеет место пассивация ненасыщенных связей солитона. Согласно [28], закрепление солитона этими примесями (случай б) является энергетически более выгодным. В результате образуются центры закрепления дислокаций с большими энергиями связи ( $E^* = 2.3-2.5$  eV для As, В и Р и 3.4 eV для N). Такие значения  $E^*$  обусловлены изменением структуры химических связей этих примесей в ядре и необходимостью их переключения при движении дислокаций (в противном случае примесный атом должен двигаться за дислокацией).

Химическое взаимодействие фосфора с краевыми ступеньками также может привести к пассивации их электрической активности, что объясняет сильное уменьшение интенсивности линий D1 и D2 в *n*-Si с  $N_p > 10^{16}$  cm<sup>-3</sup> (рис. 3 и 4). Тогда высокая интенсивность линии D1 в Cz *p*-Si (рис. 2) и упомянутые выше результаты [26,27] свидетельствуют о том, что поведение бора не согласуется с предсказываемым в [28]. В реальных кристаллах образование примесных комплексов зависит, в частности, от зарядового состояния легирующих примесей и собственных точечных дефектов, концентрации технологических примесей, вероятности образования и термической стабильности кластеров SiO<sub>x</sub>, В<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Р<sub>2</sub>O<sub>5</sub> и др. [26]. Атомы бора и фосфора отличаются значениями ковалентных радиусов (0.86, 1.10 и 1.18 Å для В, Р и Si соответственно), а в исследованных нами образцах — и знаками ионов при  $T \sim 1000^\circ\text{C}$  (положительный для Р и отрицательный для В). Видимо, при легировании бором энергетически более выгодным является зарождение кислородных преципитатов вблизи краевых ступенек, а при легировании фосфором — химическое взаимодействие фосфора со ступеньками.

В рамках рассматриваемой гипотезы причиной появления линий D1 и D2 в присутствии переходных металлов в [29] является образование краевых ступенек при переполнении дислокаций в процессе диффузии или преципитации этих примесей.

3.2. Спектры ДФЛ при энергиях  $E > 0.9$  eV. В деформированных образцах Cz *p*-Si (рис. 2) линия D4 ( $E_m = 0.998 \pm 0.001$  eV) приписывается излучению регулярных сегментов  $60^\circ$  дислокаций с равновесным значением ширины дефекта упаковки  $\Delta_0$ . Это излучение есть результат рекомбинации неравновесных электронов и дырок, захваченных в квазиодномерные зоны  $E_{Dc}$  и  $E_{Dv}$  соответственно. Деформационный потенциал  $30^\circ$  частичной дислокации играет роль слабого возмущения, величина которого зависит от расстояния между частичными дислокациями, т.е. от величины  $\Delta$ . Этот параметр влияет на глубину зон  $E_{Dc}$  и  $E_{Dv}$  и соответственно на энергию излучения. Изменить величину  $\Delta$  можно, например, охлаждением деформированного образца под большой нагрузкой до комнатной температуры [2,3]. В таком образце появляются регулярные сегменты  $60^\circ$  дислокаций с неравновесными значениями  $\Delta$ , а в спектре ДФЛ в Si — серия узких линий (вместо линии D4). При  $\Delta > \Delta_0$  каждому значению  $\Delta$  соответствует узкая линия со значением  $E_m > 1.00$  eV, дискретно увеличивающимся при увеличении  $\Delta$ , а при  $\Delta < \Delta_0$  значения  $E_m$  дискретно уменьшаются в интервале 1.00–0.93 eV. Таким образом, в образцах Cz *p*-Si с равновесной дислокационной структурой излучение с  $E_m = 0.95-0.97$  eV (вставка на рис. 2) попадает в интервал энергий, соответствующих сегментам с неравновесными значениями  $\Delta < \Delta_0$ . Это могло бы означать, что в этих образцах, кроме регулярных сегментов  $60^\circ$  дислокаций с равновесными значениями  $\Delta_0$ , присутствуют и регулярные сегменты с  $\Delta_{0e} < \Delta_0$ .

Анализ спектров ДФЛ в пластически деформированных кристаллах Ge с равновесной дислокационной структурой [30] показывает, что значение  $E_m = 0.513$  eV для полосы 1, связываемой с  $60^\circ$  дислокациями, соответствует регулярным сегментам  $60^\circ$  дислокаций с равновесным расщеплением  $\Delta_0$  только в одном образце. Для остальных образцов наблюдаются более низкие значения  $E_m = 0.497-0.508$  eV.

Из электронно-микроскопических изображений приведенных в [31], следует, что в образцах Ge с равновесной дислокационной структурой регулярные сегменты скользящих дислокаций характеризуются разными длинами и значениями  $\Delta$ . Регулярным сегментам с  $L > L_c$  соответствует значение  $\Delta_0$ , а с  $L < L_c$  — значение  $\Delta_{0e} < \Delta_0$ . Критическая длина  $L_c$  составляет  $\sim 100$  nm, т.е. для длинных ( $L > L_c$ ) сегментов выполняется соотношение  $L > (20-30) \Delta_0$ , а минимальные значения  $\Delta_{0e}$  соответствуют сегментам с  $L \sim 30$  nm.

Приведенные результаты позволяют заключить, что в Si и Ge спектральный состав ФЛ, связываемой с равновесным ансамблем регулярных сегментов  $60^\circ$  дислокаций, определяется распределением этих сегментов по длинам и значениям  $\Delta$ . Усиление излучения с  $E_m = 0.95-0.97$  eV (из-за увеличения числа  $60^\circ$  дислокаций с длинами  $L < L_c$ ) в образцах Cz *p*-Si при  $N_D > 10^7$  cm<sup>-2</sup> коррелирует с присутствием кислородных преципитатов.

В деформированных образцах FZ и Cz Si, легированных фосфором, при  $N_p > 10^{16} \text{ см}^{-3}$  линия D4 характеризуется значением  $E_m = 0.988 \pm 0.001 \text{ eV}$  (рис. 3 и 4), что на 10 eV ниже значений  $E_m$  в кристаллах с другим легированием (рис. 1 и 2). По аналогии с изложенным выше полагаем, что эти значения  $E_m$  обусловлены уменьшением длин большей части регулярных сегментов  $60^\circ$  дислокаций до значений  $L < L_c$ . Этот диапазон значений  $L$  определен по-видимому, количеством ступенек, электрическая активность которых пассивирована фосфором.

Таким образом, гипотеза о связи линий D1 и D2 со ступеньками краевого типа позволяет объяснить специфику спектров ДФЛ в кристаллах Si с большим содержанием кислорода. Кислородные преципитаты, формирующиеся в деформированных кристаллах Cz p-Si с дислокациями, влияют на количество и энергию излучения ступенек, разделяющих регулярные сегменты, а также на длину этих сегментов. Гашение линий D1 и D2 при повышенной концентрации фосфора с большой вероятностью является проявлением химического взаимодействия фосфора со ступеньками. Низкая растворимость кислорода и переходных металлов при комнатной температуре и эффективное взаимодействие этих примесей со ступеньками способствуют их концентрированию в отдельных местах на дислокациях и проявлению рекомбинационных свойств квазиодномерных дислокационных сегментов и разделяющих их дефектов.

Авторы выражают благодарность В.В. Кведеру, В.П. Киселю и А.И. Колюбакину за полезные дискуссии, Э.А. Штейману — за внимание к данной работе и обсуждение результатов и А.В. Баженову — за определение содержания кислорода и углерода в исходных кристаллах.

## Список литературы

- [1] Н.А. Дроздов, А.А. Патрин, В.Д. Ткачев. Письма в ЖЭТФ **23**, 651 (1976).
- [2] R. Sauer, C. Kisielowski-Kemmerich, H. Alexander. Appl. Phys. **A36**, 1 (1985).
- [3] A.N. Izotov, A.I. Kolyubakin, S.A. Shevchenko, E.A. Steinman. Phys. Stat. Sol. (a) **130**, 193 (1992).
- [4] V.V. Kveder, E.A. Steinman, S.A. Shevchenko, H.G. Grimmeiss. Phys. Rev. B **51**, 10 520 (1995).
- [5] A.N. Izotov, E.A. Stienman. Phys. Stat. Sol. (a) **104**, 777 (1987).
- [6] S.A. Shevchenko, Yu.A. Ossipyan, T.R. Mchedlidze, E.A. Steinman, R.A. Batto. Phys. Stat. Sol. (a) **146**, 745 (1994).
- [7] S.A. Shevchenko, A.N. Izotov. Phys. Stat. Sol. (a) **138**, 665 (1993).
- [8] T. Sekiguchi, K. Sumino. J. Appl. Phys. **79**, 3253 (1996).
- [9] O.V. Feklisova, G. Mariani-Reguta, B. Pichaud, E.B. Yakimov. Phys. Stat. Sol. (a) **171**, 341 (1998).
- [10] E.A. Steinman, V.I. Vdovin, T.G. Yugova, V.S. Avrutin, N.F. Izyumskaya. Semicond. Sci. Technol. **14**, 582 (1999).
- [11] W. Wijaranakula. J. Appl. Phys. **72**, 4026 (1992).
- [12] C. Claves, E. Simoen, J. Vanhellefont. J. Phys. III France **7**, 1469 (1997).
- [13] S. Pizzini, M. Guzzi, E. Grilli, G. Borionetti. Journal of Physics: Condens. Matter **12**, 10 131 (2000).
- [14] Ж Фридель. Дислокации. Мир, М. (1967). 644 с.
- [15] В.И. Вдовин, Н.А. Соболев, А.М. Емельянов, Е.И. Шек, Т.Г. Югова. Изв. РАН. Сер. физ. **66**, 279 (2002).
- [16] H. Gotschalk. Phys. Stat. Sol. (a) **137**, 447 (1993).
- [17] B. Shen, T. Sekiguchi, J. Jablonski, K. Sumino. J. Appl. Phys. **76**, 4540 (1994).
- [18] K. Sumino. Phys. Stat. Sol. (a) **171**, 111 (1999).
- [19] A. Cavallini, M. Vandini, F. Cirticelli, A. Armigliato. Inst. Phys. Conf. Ser. **134**, 115 (1993).
- [20] K. Minova, I. Yonenaga, K. Sumino. Mater. Lett. **11**, 164 (1991).
- [21] H. Möller, L. Long, M. Werner, D. Yang. Phys. Stat. Sol. (a) **171**, 175 (1999).
- [22] A.N. Drozdov, A.A. Patrin, V.D. Tkachev. Phys. Stat. Sol. (b) **83**, K137 (1977).
- [23] A.N. Drozdov, A.A. Patrin, V.D. Tkachev. Phys. Stat. Sol. (a) **64**, K63 (1981).
- [24] А.Н. Изотов, Э.А. Штейнман. ФТТ **28**, 1172 (1980).
- [25] A. Borghesi, B. Pivac, A. Sassela, A. Stella. J. Appl. Phys. **77**, 4169 (1995).
- [26] S. Hahn, F.A. Ponce, W.A. Tiler, V. Stojanov, D.A.P. Bulla, W.E. Castro, jr. J. Appl. Phys. **64**, 4454 (1988).
- [27] M. Imai, K. Sumino. Phil. Mag. **A47**, 599 (1983).
- [28] R. Jones, A. Umerski, P. Sitch, M.I. Heggie, S. Öberg. Phys. Stat. Sol. (a) **138**, 369 (1993).
- [29] E.C. Lightowers, V. Higgs. Phys. Stat. Sol. (a) **138**, 665 (1993).
- [30] А.И. Колюбакин, Ю.А. Осипьян, С.А. Шевченко, Э.А. Штейнман. ФТТ **26**, 677 (1984).
- [31] G. Packeiser, P. Haasen. Phil. Mag. **35**, 821 (1977).