

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ p -InAs<Mn>

Георгицэ Е. И., Постолаки И. Т., Смирнов В. А., Унтила П. Г.

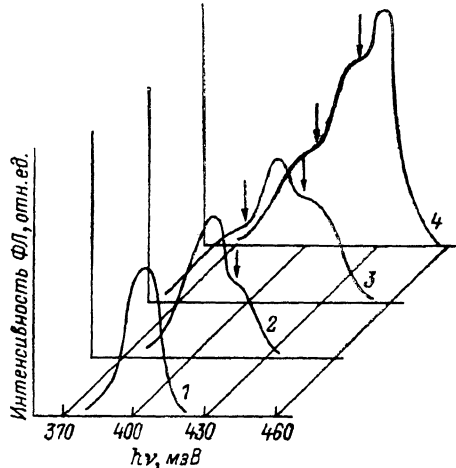
Исследованию излучательной рекомбинации арсенида индия и твердых растворов на его основе посвящено значительное число работ [1-5]. В большинстве из них приведены результаты исследования спектров фотолюминесценции (ФЛ) арсенида индия n -типа.

В настоящем сообщении представлены некоторые результаты исследования спектров ФЛ p -InAs, легированного марганцем, при 77 и 4.2 К.

Монокристаллические образцы InAs<Mn> с содержанием марганца в диапазоне $8 \cdot 10^{16} - 3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ были выращены методом Бриджмена. На полученных образцах были произведены измерения коэффициента Холла, проводимости.

Известно, что марганец в арсениде индия обладает стабильной валентностью $+2$ и является однозарядным акцептором [1, 2]. Все исследованные нами образцы арсенида индия, легированного марганцем, имели при 300 К дырочную проводимость.

Перед измерением спектра ФЛ образцы травились в полирующем травителе (Br : бутанол). Спектры ФЛ измерялись по импульсной методике. Неравновесные носители возбуждались



Спектры ФЛ для InAs при 77 (1-3) и 4.2 К (4).

Концентрация, см^{-3} : 1 — $8 \cdot 10^{16}$, 2 — $2 \cdot 10^{17}$, 3, 4 — $3 \cdot 10^{18}$.

с помощью полупроводникового гетеролазера на основе $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$. Сигнал ФЛ на выходе монохроматора МДР-23 регистрировался фотоприемником Ge<Au>.

На рисунке приведены экспериментальные результаты измерения спектров ФЛ арсенида индия для трех степеней легирования. Спектр рекомбинационного излучения InAs с малой концентрацией марганца при 77 К состоит из одной полосы (кривая 1).

Экспериментально обнаружено, что при увеличении содержания марганца полуширина наблюдаемой линии ФЛ увеличивается, а ее максимум смещается в коротковолновую область спектра. Кроме того, начиная с концентрации марганца $2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при 77 К в спектре ФЛ появляется дополнительная линия (кривая 2). Максимум второго пика находится на энергетическом расстоянии ~ 30 мэВ от основного пика. Полученные значения для энергии активации акцептора согласуются с данными работы [3].

Для образца с концентрацией марганца $3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ был измерен спектр ФЛ при 4.2 К (кривая 4). Из представленного спектра видно, что при более низких температурах интенсивность коротковолновой полосы существенно увеличивается и появляется особенность в длинноволновом крыле спектра ФЛ.

Исследования температурной зависимости интенсивности фотолюминесценции позволяют предположить, что при температурах ниже 25 К коротковолновая полоса связана с излучательными переходами с участием мелких доноров и акцепторов, а при более высоких температурах ($T > 30$ К) данная полоса соответствует межзонным переходам. Средняя полоса (кривая 3), по видимому, связана с переходами зона проводимости—акцептор. Особенности длинноволновой области спектра ФЛ связаны, очевидно, с донорно-акцепторной рекомбинацией [4].

- [1] Мастеров В. Ф. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 1. С. 3—23.
 [2] Мастеров В. Ф., Саморуков Б. Е. // ФТП. 1978. Т. 12. В. 4. С. 625—652.
 [3] Андрианов Д. Г., Каратаев В. В., Лазарева Г. В., Муравлев Ю. Б., Савельев А. С. // ФТП. 1977. Т. 11. В. 7. С. 1252—1259.
 [4] Георгица Е. И., Постолаки И. Т., Смирнов В. А., Увтила П. Г., Юлдашев Ш. У. // Материалы для полупроводниковой электроники. Кишинев, 1986. С. 155—159.
 [5] Зотова Н. В., Карадашев С. А., Матвеев Б. А., Стусь Н. М., Талалакин Г. Н., Блинец Ю. Ю. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 6. С. 1079—1084.

Тираспольский государственный
 педагогический институт
 им. Т. Г. Шевченко

Получено 6.10.1988
 Принято к печати 7.12.1988

ФТП, том 23, вып. 4, 1989

КЛАСТЕРНЫЙ РАСЧЕТ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ЗАРЯДОВ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ

Грехов А. М., Кустов В. Е., Трипачко Н. А., Шаховцов В. И.

Введение дефектов (примесей, термических и радиационных дефектов) приводит к образованию в монокристалле деформационных полей. Экспериментальное и теоретическое определение характеристик полей внутренних упругих напряжений является актуальной задачей физики твердого тела [1, 2]. Значительный интерес представляет эта проблема в случае монокристаллического кремния. Для этого материала был предложен метод парамагнитных тензонзондов (МПТЗ) [3, 4], позволяющий с достаточной точностью определять величину деформационного заряда различных дефектов. Кроме того, для кремния проведено значительное количество рентгеновских измерений изменения параметра решетки при введении примесей, например кислорода [5], углерода [6, 7], германия [7, 8] и др.

Цель настоящей работы — оценка деформационных зарядов дефектов в кремнии на основе кластерных квантово-химических расчетов и сравнение полученных результатов с экспериментом.

Величина деформационного заряда дефекта (A) в приближении упругого континуума с учетом сил поверхностного натяжения в кубическом кристалле имеет вид [2]

$$A = \frac{\Delta V}{4\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{C_{11}}{C_{11} + 2C_{12}},$$

где ν — коэффициент Пуассона, C_{11} и C_{12} — постоянные упругой жесткости, ΔV — изменение объема кристалла при введении одного дефекта данного типа. Таким образом, расчет деформационного заряда дефекта сводится к вычислению величины ΔV . Эта задача решается с использованием кластерного подхода, в котором фрагмент структуры реального кристалла моделируется кластером промежуточного размера. При этом кластер, содержащий 15—30 атомов, в том числе интересующие нас дефекты и их ближайшие соседи, извлекается из решетки и рассматривается как большая молекула. Геометрические конфигурации связей атомов кластера определяются обычными требованиями к валентной связи для данного типа атомов и из условия минимизации полной энергии кластера.

На начальном этапе исследований выбраны односферный $[\text{SiSi}_4\text{H}_{12}]$ и двухсферный $[\text{SiSi}_4\text{Si}_{12}\text{H}_{36}]$ кластеры, в которых роль граничных условий играют атомы водорода, насыщающие оборванные связи. На первый взгляд, выбор кластеров таких размеров для рассмотрения дальнедействующей деформации, связанной с наличием дефектов, может показаться недостаточно обоснованным.