

УДК 535.377

DOI 10.25205/2541-9447-2017-12-4-66-72

А. С. Вохминцев, М. Г. Минин, И. А. Вайнштейн

*Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002, Россия*

a.s.vokhmintsev@urfu.ru

ПАРАМЕТРЫ СПЕКТРАЛЬНО-РАЗРЕШЕННОЙ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ГЕКСАГОНАЛЬНОГО НИТРИДА БОРА

Методами термостимулированной люминесценции (ТСЛ) со спектральным разрешением исследованы облученные ультрафиолетовым излучением с длиной волны 210 нм микропорошки гексагонального нитрида бора (h-BN). Определены значения параметров (энергия активации, эффективный частотный фактор и порядок кинетики) многоловушечной системы. Показано, что ТСЛ в полосах 380 и 425 нм обусловлена переходами электронов с уровней одно- (1В) и трехборных (3В) центров с энергией 0,7 и 1,2 эВ ниже дна зоны проводимости на дырочные уровни углерода (C_N -центры) с энергией 1,4 эВ выше потолка валентной зоны соответственно. Обнаружено, что при термической активации электронных (1В- и 3В-центров) и дырочных (C_N -центров) ловушек в механизмах ТСЛ доминируют процессы первого и второго порядка кинетики соответственно. Предложен механизм туннелирования заряда с глубоких электронных ловушек на уровни 1В- и 3В-центров для образцов h-BN при нагревании.

Ключевые слова: h-BN, вакансия азота, одноборный и трехборный центр, примесь кислорода и углерода, электронные и дырочные ловушки, туннельный эффект.

Введение

Гексагональный нитрид бора (h-BN) является графитоподобным материалом с шириной запрещенной зоны от 3,5 до 6,5 эВ в зависимости от технологии синтеза, примесного состава, морфологии, упорядоченности и др. [1], что обеспечивает его перспективное применение в оптоэлектронике [2] и люминесцентной твердотельной дозиметрии ионизирующих излучений [3] в качестве эмиттерных и детекторных сред в области УФ и видимого диапазонов. Известно, что собственные и примесные дефекты в h-BN образуют сложную систему взаимодействующих электронных и дырочных ловушек заряда и в значительной степени определяют его абсорбционные, эмиссионные и дозиметрические свойства [3–5].

Углерод и кислород являются основными неконтролируемыми примесями в h-BN [4]. Атомы С в позициях азота и бора в кристаллической решетке образуют C_N - и C_B -центры, являющиеся глубокими электронной и дырочной ловушками соответственно [6; 7]. Атомы О в позициях азота в кристаллической решетке образуют O_N -центры и являются электронными ловушками с энергией активации $E = 0,3–0,5$ эВ [8; 9]. Кроме того, при синтезе и облучении электронами образцов h-BN образуются электронные ловушки типа трех- (3В-) и одноборных (1В-) центров с энергиями активации $E = 1,0$ и $0,7$ эВ соответственно [6; 8; 9]. 3В-центр является вакансией азота (V_N -центром), захватившей электрон, который взаимодействует с тремя соседними эквивалентными атомами бора [6; 9]. В оксидах данный тип дефек-

Вохминцев А. С., Минин М. Г., Вайнштейн И. А. Параметры спектрально-разрешенной термолюминесценции гексагонального нитрида бора // Сибирский физический журнал. 2017. Т. 12, № 4. С. 66–72.

та называют F-центром [10]. Природа 1В-центра в настоящее время не идентифицирована, но по данным ЭПР обусловлена неспаренным электроном взаимодействующего с одним атомом бора [9].

Перечисленные дефекты, в свою очередь, выступают также в роли центров рекомбинации и обуславливают люминесценцию по донорно-акцепторному механизму при их близком расположении в кристаллической решетке нитрида бора [11; 12].

Ранее показано [13; 14], что для образцов h-BN регистрируются ТЛ пики с максимумами при температурах $T_{\max} = 325, 360, 475$ и 575 К в полосах свечения 330 нм (3,75 эВ), 380 нм (3,26 эВ) и 425 нм (2,92 эВ) при температуре выше комнатной. Существующие на сегодняшний день зонные схемы для h-BN [9; 11] не позволяют в полной мере объяснить регистрируемый спектральный состав ТЛ, а также количество разрешаемых ТЛ пиков в известных полосах свечения и их природу. В то же время имеются противоречивые данные о значениях энергий активации и эффективного частотного фактора при их оценке из экспериментальных термоактивационных кривых методом подгонки, что требует привлечения дополнительных ТСЛ методик. Таким образом, остаются вопросы, связанные с идентификацией и определением кинетических параметров ловушек носителей заряда, а также механизмов их взаимодействия между собой.

В этой связи цель работы заключалась в определении параметров ловушек в микропорошке h-BN методами термостимулированной люминесценции со спектральным разрешением как по форме ТСЛ кривых (численная аппроксимация кривой и анализ формы пика), так и по участкам начального роста интенсивности ТСЛ.

Образцы и экспериментальные методы

В работе исследовался микропорошок гексагонального нитрида бора, синтезированный на опытном заводе «УНИХИМ с ОП» модифицированным методом О'Коннора [15]. Весовой химический состав образцов, по данным производителя: нитрид бора – 98,9 %, борный ангидрид – 0,17 %, углерод – 0,22 %.

Для аттестации исследуемого вещества проведены измерения на дифрактометре Shimadzu XRD-7000 в излучении K_{α} меди с монохроматором на вторичном пучке. Результаты представлены на рис. 1. Обработка дифрактограмм осуществлялась с использованием программы полнопрофильного анализа Ритвельда и картотеки PDF-2. Дифрактограмма содержит типичные линии для гексагональной структуры: (002), (100), (101), (102), (004), (103), (110), (112) и (006) при $2\theta = 26,7, 41,5, 43,8, 50,0, 55,0, 59,4, 75,8, 82,0$ и $87,8^{\circ}$ соответственно. По результатам анализа выявлено, что образец содержит 99 % гексагонального нитрида бора с параметрами кристаллической решетки $a = 2,5044 \text{ \AA}$ и $c = 6,6562 \text{ \AA}$ и размером области когерентного рассеяния $OKP = 270 \text{ \AA}$.

Морфология исследуемого порошка изучалась с помощью настольного растрового электронного микроскопа (РЭМ) Phenom Pure в режиме регистрации отраженных электронов при напряжении на катоде 5 кВ. На вставке рис. 1 представлено РЭМ изображение поверхности исследуемого микропорошка h-BN. Видно, что полученный порошок состоит из частиц в виде хлопьев с характерными элементами чешуйчатой формы со средним размером 4–10 мкм.

Измерения термолюминесценции проводились с помощью лабораторной спектроскопической установки на основе флуоресцентного спектрометра Perkin Elmer LS55 со встроенной высокотемпературной приставкой [16], позволяющей осуществлять синхронизированные нагрев и регистрацию свечения материалов в диапазоне температур

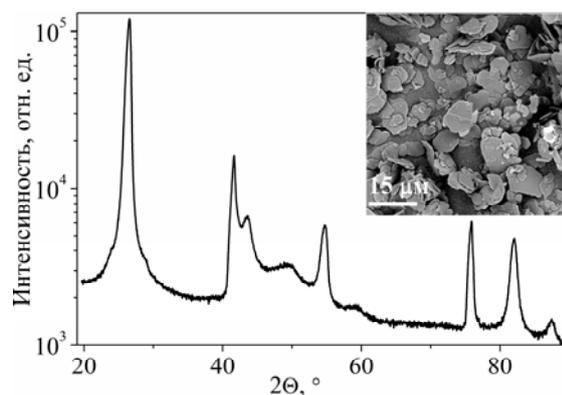


Рис. 1. Дифрактограмма образцов h-BN
Вставка – РЭМ изображение микропорошка h-BN

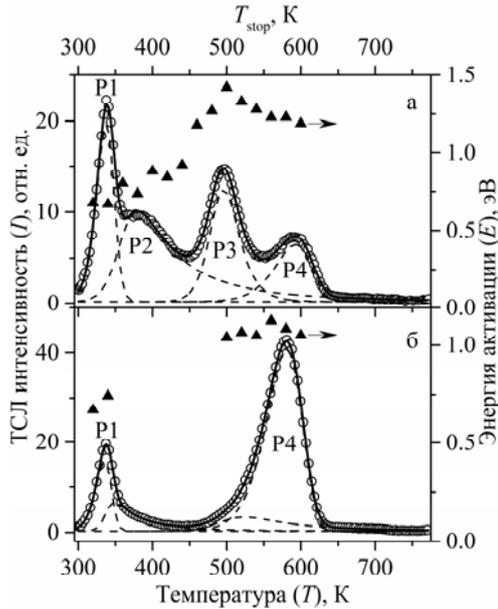


Рис. 2. Аппроксимация экспериментальных ТСЛ кривых в полосах свечения 425 (а) и 380 нм (б) для образцов h-BN. Кружки – эксперимент; сплошные линии – аппроксимации; пунктирные линии – компоненты согласно выражению (1); треугольники – значения энергии активации

300–773 К. Скорость нагрева исследуемого материала составляла $\beta = 2$ К/с. Перед началом измерений образцы h-BN подвергались отжигу до 773 К с последующим естественным охлаждением на воздухе в защищенной от света камере спектрометра. Для возбуждения ТСЛ порошок облучался монохроматическим ($\lambda_{\text{ex}} = 210 \pm 5$ нм) ультрафиолетовым излучением Хе-лампы при комнатной температуре в течение 5 мин. Доза облучения при заданных параметрах составляла 1 мДж. Регистрация ТСЛ проводилась в спектральных диапазонах 425 ± 10 и 380 ± 10 нм.

При регистрации кривых начального роста интенсивности ТСЛ образцы после облучения нагревались с $\beta = 2$ К/с до температуры $T_{\text{stop}} = 320$ К с последующим естественным охлаждением до комнатной температуры. Далее после увеличения T_{stop} на 20 К процедура измерений повторялась. Таким образом, значения температуры T_{stop} изменялись в диапазоне 320–760 К с шагом 20 К.

Аппроксимация ТСЛ кривых

На рис. 2 представлены экспериментальные ТСЛ кривые в исследуемых полосах свечения. Видно, что кривые отличаются

количеством ТСЛ пиков в исследуемом температурном диапазоне. Так, в полосе 425 нм разрешаются четыре ТСЛ пика (P1–P4) с температурами максимумов $T_{\text{max}} \approx 338, 377, 495$ и 591 К и соотношением интенсивностей в максимуме $I_{\text{max}} \approx 10 : 5 : 7 : 3$ соответственно. В полосе 380 нм наблюдаются два ТСЛ пика (P1 и P4) с $T_{\text{max}} \approx 338$ и 580 К и соотношением интенсивностей $I_{\text{max}} = 1 : 2$. В исследуемых полосах регистрируется также менее интенсивное высокотемпературное свечение в диапазоне 650–750 К.

Экспериментальные ТСЛ кривые, приведенные на рис. 2, анализировались в рамках формализма кинетики общего порядка [17]:

$$I(T) = s'' \cdot n_0 \cdot e^{-\frac{E}{kT}} \times \left(1 + \frac{s'' \cdot (b-1)}{r} \cdot \int_{T_0}^T e^{-\frac{E}{kT'}} \cdot dT' \right)^{\frac{b}{b-1}}, \quad (1)$$

где s'' – «эффективный» частотный фактор, с^{-1} ; n_0 – концентрация электронов на ловушках в начальный момент времени, м^{-3} ; E – энергия активации, эВ; k – постоянная Больцмана, эВ/К; T – температура образца, К; b – порядок кинетики; T_0 – начальная температура, К.

Примеры разложения ТСЛ кривых на несколько пиков приведены на рис. 2 пунктирными линиями. Видно, что расчетные кривые (сплошные линии) с высокой степенью точности (коэффициент детерминации $R^2 > 0,998$) описывают результаты эксперимента.

Анализ данных аппроксимации показал, что для пиков P1 и P4 получены близкие значения $E = 0,95$ и $1,2$ эВ, $s'' = (1-7) \cdot 10^{13}$ и $(1-2) \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$, $b = (1,2 \text{ и } 1,0) \pm 0,1$ соответственно. В то же время для пиков P2 и P3 в полосе 425 нм – $E = 0,84$ и $1,59$ эВ, $s'' = 1 \cdot 10^{10}$ и $2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $b = (6,0 \text{ и } 2,2) \pm 0,1$ соответственно. Полученные результаты аппроксимации удовлетворительно согласуются с предыдущими нашими исследованиями при облучении нефилтрованным светом Хе-лампы [14]. Высокое значение порядка кинетики для пика P2 может быть обусловлено участием нескольких активных ловушек, ответственных за формирование данной ТСЛ, их взаимодействием или термоактивацией дополнительного канала рекомбинации в исследуемом температурном диапазоне.

Особенностью метода аппроксимации кривой является возможность определения кинетических параметров для системы изолированных ловушек. Данный метод удобно использовать при отсутствии какой-либо информации о многоловушечной системе. Однако в этом случае необходимо учитывать температурное гашение свечения при оценке истинных значений параметров [17]. В случае же взаимодействующих ловушек корректность аппроксимации может быть обусловлена захватом носителей заряда на более глубокие ловушки [17], а также туннелированием носителей заряда с глубоких ловушек на близкие мелкие ловушки [18]. Учет данных механизмов является важной фундаментальной задачей, для решения которой необходимо проведение дополнительных исследований. В этой связи для проверки корректности полученных значений параметров были применены ТСЛ методы анализа формы пика и начального роста.

Анализ формы пиков

В исследуемых полосах свечения методом анализа формы пика был выполнен расчет энергии активации в предположении процессов первого порядка кинетики. Оценки проводились для тех ТСЛ максимумов, для которых можно определить полуширину по характерным точкам на полувысоте термоактивационной кривой. [17]. Полученные значения параметров представлены в таблице.

Метод начального роста интенсивности ТСЛ

На рис. 3 приведены экспериментальные кривые начального роста интенсивности ТСЛ в аррениусовых координатах для исследуемых полос свечения. Видно, что полученные данные в координатах $\lg(I)-1/kT$ представляют собой прямые линии с различными величинами угла наклона, величина которого определяет энергию активации ловушек, ответственных за ТСЛ [17].

На рис. 2 показаны оценки энергии активации, полученные методом начального роста (см. рис. 3, треугольные символы), для соответствующих температур T_{stop} . Анализ данных показал, что в исследуемом температурном диапазоне в полосах 425 и 380 нм можно выделить несколько участков с $E \approx$

$\approx 0,7, 0,8, 1,3-1,6$ и $1,1-1,2$ эВ для пиков P1, P2, P3 и P4 соответственно. Полученные значения E приведены в таблице в сравнении с расчетными оценками других ТСЛ методик.

Оценки значений энергии активации ТСЛ процессов в исследуемых полосах, полученные различными методами

Метод	$\lambda_{em},$ нм	$E \pm 0,1, \text{ эВ}$			
		P1	P2	P3	P4
Аппроксимации кривой	425	0,92	0,84	1,59	1,19
	380	0,97	–	–	1,20
Формы пика	425	0,60	–	1,27*	–
	380	0,78	–	–	1,17
Начального роста	425	0,68	0,8	1,42	1,22
	380	0,71	–	–	1,07

* Оценка выполнена для порядка кинетики $b = 2$.

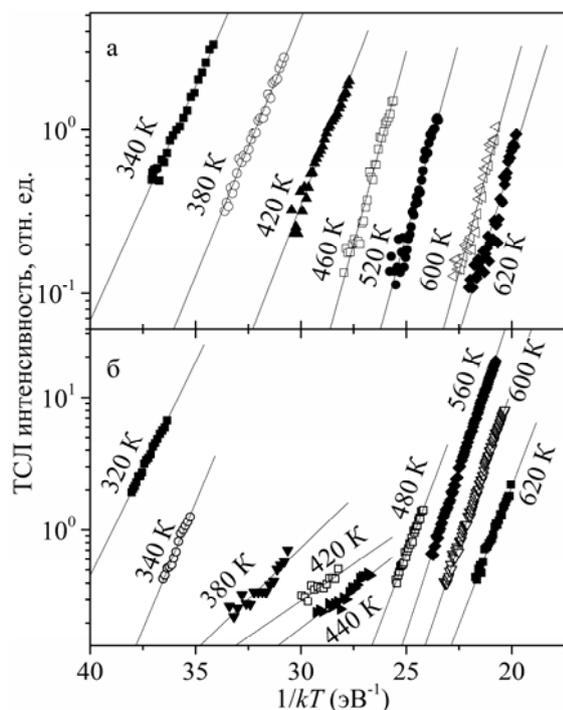


Рис. 3. ТСЛ кривые в аррениусовых координатах в полосах свечения 425 (а) и 380 нм (б) для соответствующих температур T_{stop} в h-BN. Символы – экспериментальные данные; линии – линейные аппроксимации выделенных участков

Видно, что для пика P1 наблюдается разброс значений в диапазоне $E = 0,6-1,0$ эВ. Пик P1 расположен в низкотемпературной части пика P2, что приводит к их влиянию друг на друга, и использовать метод численной аппроксимации кривой в этом случае не совсем корректно.

Отметим, что для всех используемых ТЛ методик энергия активации ловушки, ответственной за пик P3, больше, чем для более высокотемпературного пика P4 (см. таблицу). Согласно теории, указанная ситуация возможна в случае, если значение частотного фактора для более глубокой ловушки будет больше. Этот факт подтверждается существенным отличием значений эффективного частотного фактора $s'' \sim 10^{15}$ и $\sim 10^9$ с⁻¹ для пиков P3 и P4 соответственно. Сказанное также может указывать на различную природу ловушек, ответственных за исследуемую ТСЛ.

Природа ТСЛ пиков

Ранее были получены значения $E = 0,7$ и $1,0$ эВ методами электронного парамагнитного резонанса, ТСЛ, термостимулированной проводимости [9] и квантово-механическими расчетами [19]. С учетом этого можно заключить, что ТСЛ пики P1 и P4 формируются с участием электронных 1В- и 3В-центров соответственно.

За пик P3 ответственна дырочная ловушка на основе C_N -центра с $E = 1,4$ эВ, что также удовлетворительно согласуется с независимыми теоретическими [6; 7] и экспериментальными [9; 11] исследованиями. Существование в материале лишь одного типа дырочных ловушек должно приводить при нагреве к значительному доминированию процессов перезахвата над процессами рекомбинации, которые возможны лишь для близкорасположенных центров. Концентрация соответствующих донорно-акцепторных пар значительно ниже общей концентрации дырочных ловушек. Этот факт удовлетворительно согласуется с преобладанием процессов второго порядка в кинетике ТСЛ пика P3, регистрируемого в полосе 425 нм.

Предположим, что низкотемпературный пик P2 обусловлен процессами туннелирования с более глубокой электронной ловушкой с $E \geq 1,6$ эВ на близко расположенные менее глубокие электронные 3В- и 1В-центры с $E = 1,2$ и $0,7$ эВ соответственно. Ранее

методами электронного парамагнитного резонанса, термостимулированной люминесценции и проводимости показано, что существуют глубокие электронные ловушки, которые опустошаются в температурном диапазоне 650–850 К [9]. В то же время образование глубоких электронных ловушек связанных с комплексами вакансий азота (2- V_N - и 3- V_N -центрами) [20] или примесью углерода (C_B -центрами) [6] в h-BN подтверждено теоретически и экспериментально.

В настоящее время механизмы термоактивационного туннелирования заряда с ловушек на центры рекомбинации при их близком расположении в широкозонных материалах активно изучаются [18; 21; 22]. Например, туннелирование регистрировалось в порошках YPO_4 : Ce, Ln с электронных ловушек Ln^{2+} (Ln = Er, Nd, Ho, Dy) на рекомбинационные центры Ce^{4+} [21] и в бразильском кальците с $(CO_2)^-$ и $(CO_3)^{3-}$ -ловушек на Mn^{2+} -центры рекомбинации [22].

На основании полученных результатов и анализа данных независимых исследований [9; 11] можно сказать, что при термической стимуляции облученных ультрафиолетовым излучением образцов h-BN протекают одновременно несколько процессов перераспределения заряда в материале. Во-первых, захват / перезахват носителей заряда в многоловушечной системе с последующей излучательной рекомбинацией по донорно-акцепторному механизму. Во-вторых, захват носителей заряда на более глубокие ловушки и нахождение там продолжительное время. Указанные процессы перераспределения носителей заряда на ловушках идут через зоны, что удовлетворительно согласуется с теоретическими и экспериментальными исследованиями методами термостимулированной проводимости [9] и полевой эмиссии электронов [8; 23; 24] для нитрида бора. В-третьих, возможно туннелирование электронов с глубокой ловушки на менее глубокие, о чем свидетельствует регистрируемая менее интенсивная ТЛ в температурном диапазоне 650–750 К в исследуемых полосох свечения (см. рис. 2).

Заключение

Выполнено исследование облученных монокроматическим УФ излучением 210 нм микропорошков h-BN, синтезированных модифицированным методом О'Коннора, в по-

лосах свечения 425 ± 10 и 380 ± 10 нм методами подгонки кривой, формы пика и начального роста. Показано, что при температурах выше комнатной в полосе 425 нм разрешаются четыре ТЛ пика (P1–P4) с $T_{\max} \approx 338, 377, 495$ и 591 К соответственно.

Определены значения энергий активации $E \approx 0,7$ и $1,2$ эВ, эффективного частотного фактора $s'' = (1-7) \cdot 10^{13}$ и $(1-2) \cdot 10^9$ с⁻¹ для пиков P1 и P2 соответственно. Установлено, что в термостимулированных механизмах формирования указанных пиков доминируют процессы первого порядка кинетики. Сопоставление полученных экспериментальных данных с имеющимися в литературе позволяет утверждать, что ТСЛ пики P1 и P4 имеют электронную природу и связаны с 1В- и 3В-центрами соответственно.

Высказано предположение, что пик P3 с $E = 1,42$ эВ и $s'' = 2 \cdot 10^{15}$ с⁻¹ обусловлен глубокой дырочной ловушкой на основе C_N-центра. Продемонстрировано, что в термостимулированных механизмах пика P3 доминируют процессы второго порядка кинетики.

Основываясь на высоких значениях полученного порядка кинетики для пика P2 и регистрируемом свечении малой интенсивности в области 650–750 К, мы предположили наличие дополнительного термоактивационного излучательного канала люминесценции путем туннелирования с глубокой электронной ловушки на 1В- и 3В-центры в h-BN.

Список литературы

1. Yao B., Shen Z. X., Liu L., Su W. H. Strong deep-blue photoluminescence of mesographite boron nitride // *Journal of Physics Condensed Matter*. 2004. Vol. 16. Iss. 12. P. 2181–2186.
2. Watanabe K., Taniguchi T., Kanda H. Direct-bandgap properties and evidence for ultraviolet lasing of hexagonal boron nitride single crystal // *Nature Materials*. 2004. Vol. 3. Iss. 6. P. 404–409.
3. Vokhmintsev A. S., Minin M. G., Weinstein I. A. Application of hexagonal boron nitride micropowder for thermoluminescent dosimetry of UV radiation // *Radiation Measurements*. 2015 DOI: 10.1016/j.radmeas.2016.01.002.
4. Taniguchi T., Watanabe K. Synthesis of high-purity boron nitride single crystals under high pressure by using Ba-BN solvent // *Journal of Crystal Growth*. 2007. Vol. 303. Iss. 2. P. 525–529.
5. Bourrellier R., Amato M., Galvão Tizei L. H., Giorgetti C., Gloter A., Heggie M. I., March K., Stéphane O., Reining L., Kociak M., Zobelli A. Nanometric Resolved Luminescence in h-BN Flakes: Excitons and Stacking Order // *ACS Photonics*. 2014. Vol. 1. Iss. 9. P. 857–862.
6. Huang B., Lee H. Defect and impurity properties of hexagonal boron nitride: A first-principles calculation // *Physical Review B*. 2012. Vol. 86. Iss. 24. P. 245406.
7. Fujimoto Y., Saito S. Effects of strain on carbon donors and acceptors in hexagonal boron nitride monolayers // *Physical Review B*. 2016. Vol. 93. Iss. 4. P. 045402.
8. Ohtani S., Yano T., Kondo S., Kohno Y., Tomita Y., Maeda Y., Kobayashi K. Electron emission from h-BN films codoped with Mg and O atoms // *Thin Solid Films*. 2013. Vol. 546. P. 53–57.
9. Katzir A., Suss J.T., Zunger A., Halperin A. Point defects in hexagonal boron nitride. I. EPR, thermoluminescence, and thermally-stimulated-current measurements // *Physical Review B*. 1975. Vol. 11. Iss. 6. P. 2370–2377.
10. Вайнштейн И. А., Вохминцев А. С., Кортов В. С. Особенности температурного тушения фотолюминесценции 3.0 эВ в монокристаллах alpha-Al₂O₃ // *Письма в ЖТФ*. 2006. Т. 32, вып. 2. С. 21–27.
11. Museur L., Feldbach E., Kanaev A. Defect-related photoluminescence of hexagonal boron nitride // *Physical Review B*. 2008. Vol. 78. Iss. 15. P. 155204.
12. Du X. Z., Li J., Lin J. Y., Jiang H. X. The origin of deep-level impurity transitions in hexagonal boron nitride // *Applied Physics Letters*. 2015. Vol. 106. Iss. 2. P. 021110.
13. Vokhmintsev A. S., Minin M. G., Henaish A. M. A., Weinstein I. A. Spectrally resolved thermoluminescence measurements in fluorescence spectrometer // *Measurement*. 2015. Vol. 66. P. 90–94.
14. Weinstein I. A., Vokhmintsev A. S., Minin M. G., Kartashov V. V., Chernetsky I. V. Spectral and kinetic features of thermoluminescence in hexagonal boron nitride powder after UV-irradiation // *Radiation Measurements*. 2013. Vol. 56. P. 236–239.
15. Нечепуренко А. С., Ласыченков Ю. Я., Сорокин И. Н., Бекетов В. А., Самунь С. В. Способ получения нитрида бора графитоподобной гексагональной структуры // Патент

на изобретение РФ № 2266865 от 06.12.2004.

16. *Вохминцев А. С., Минин М. Г., Чайкин Д. В., Вайнштейн И. А.* Высокотемпературная приставка для измерения спектральных характеристик термолюминесценции // Приборы и техника эксперимента. 2014. № 3. С. 139–143.

17. *Chen R., McKeever S. W. S.* Theory of thermoluminescence and related phenomena / Singapore: World Scientific Publ., 1997. 559 p.

18. *Kitis G., Pagonis V.* Properties of thermoluminescence glow curves from tunneling recombination processes in random distributions of defects // Journal of Luminescence. 2014. Vol. 153. P. 118–124.

19. *Zunger A., Katzir A.* Point defects in hexagonal boron nitride. II. Theoretical studies // Physical Review B. 1975. Vol. 11. No. 6. P. 2378–2390.

20. *Гриняев С. Н., Конусов Ф. В., Лопатин В. В.* Глубокие уровни комплексов вакансий азота в графитоподобном нитриде бора // ФТТ. 2002. Т. 44, вып. 2. С. 275–282.

21. *Dobrowolska A., Bos A. J. J., Dorenbos P.* Electron tunnelling phenomena in $\text{YPO}_4:\text{Ce},\text{Ln}$ (Ln = Er, Ho, Nd, Dy) // Journal of Physics D: Applied Physics. 2014. Vol. 47. Iss. 33. P. 335301.

22. *De Lima J. F., Valerio M. E. G., Okuno E.* Thermally assisted tunneling: An alternative model for the thermoluminescence process in calcite. Physical Review B. 2001. Vol. 64. Iss. 1. P. 141051–141056.

23. *Chen G.-D., Wang L.-D., An B., Yang M.* First principles study of electron field emission from the system of BN nano tuber capped and doped with carbon atom // Wuli Xuebao/Acta Physica Sinica. 2009. Vol. 58. Iss. SPEC. ISS. P. S254–S258.

24. *Wang R. Z., Zhou H., Song X. M., Wang B., Wang H., Yan H.* Effects of phase formation on electron field emission from BN films. // Journal of Crystal Growth. 2006. Vol. 291. Iss. 1. P. 18–21.

Материал поступил в редколлегию 16.08.2017

A. S. Vokhmintsev, M. G. Minin, I. A. Weinstein

*Ural Federal University
19 Mir Str., Ekaterinburg, 620002, Russian Federation*

a.s.vokhmintsev@urfu.ru

PARAMETERS OF THE SPECTRAL-RESOLVED THERMOLUMINESCENCE OF HEXAGONAL BORON NITRIDE

Micropowders of hexagonal Boron Nitride (h-BN) irradiated by ultraviolet light with 210 nm wavelength were studied by the means of thermally stimulated luminescence (TSL) with spectral resolution. Parameters (activation energy, effective frequency factor, kinetics order) were determined for the case of multitraps system. It was shown that TSL in 380 nm and 425 nm was caused by the escape of electrons from single- (1B) and three-boron (3B) centers with energy levels 0.7 and 1.2 eV below the bottom of the conduction band to the Carbon hole levels (C_N -centers) with energy 1.4 eV above the top of the valence band. It was found that under the thermal activation of electron (1B- and 3B-centers) and hole (C_N -centers) traps in the TSL mechanisms the processes of first and second order of kinetics were dominating, respectively. A tunneling mechanism for charge transfer from deep electron traps to 1B- and 3B-centers in heated h-BN samples was proposed.

Keywords: h-BN, nitrogen vacancy, single-boron center, three-boron center, oxygen and carbon impurity, electron and hole traps, tunneling effect.