
ДЕФЕКТНО-ПРИМЕСНАЯ ИНЖЕНЕРИЯ. РАДИАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КРЕМНИЯ, ИМПЛАНТИРОВАННОГО ИОНАМИ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

А. В. Мудрый¹, В. Д. Живулько¹, О. М. Бородавченко¹,
Ж. В. Смагина², В. А. Зиновьев², А. В. Двуреченский²

¹) Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению,
ул. П. Бровки, 19, 220072 Минск, Беларусь,
e-mail: mudryi@physics.by

²) Институт физики полупроводников им. А. В. Рязанова СО РАН,
пр. ак. Лаврентьева, 13, 630090 Новосибирск, Россия,
e-mail: smagina@isp.nsc.ru

Для исследования природы дефектов в ионно-имплантированном кремнии использована низкотемпературная (4.2 К) фотолюминесценция. Установлено, что отжиг имплантированного кремния при температурах $\sim 25\text{--}600^\circ\text{C}$ приводит к появлению в спектрах фотолюминесценции различных электронно-колебательных полос с бесфононными линиями, которые связаны с ионно-индуцированными точечными дефектами. Широкие полосы фотолюминесценции, обнаруженные на высокотемпературных стадиях отжига $\sim 600\text{--}900^\circ\text{C}$, отнесены к излучательной рекомбинации на дислокациях.

Ключевые слова: кремний; имплантация; фотолюминесценция; дефекты; дислокации.

PHOTOLUMINESCENCE OF SILICON IMPLANTED BY SILICON AND GERMANIUM IONS

A. V. Mudryi¹, V. D. Zhivulko¹, O. M. Borodavchenko¹,
Zh. V. Smagina², V. A. Zinoviev², A. V. Dvurechenskii²

¹) Scientific and Practical Center of the National Academy of Sciences of Belarus for Materials Science, P. Brovki str, 19, 220072 Minsk, Belarus,

²) Rzhzanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Lavrentiev aven., 13, 630090 Novosibirsk, Russia,
Corresponding author: A. V. Mudryi (mudryi@physics.by)

Low-temperature (4.2 K) photoluminescence was employed to investigate the nature of defects in ion-implanted silicon. It was found that annealing of the implanted silicon at temperatures of $25\text{--}600^\circ\text{C}$ leads to the appearance in the photoluminescence spectra of various electron-vibrational bands with zero-phonon lines that are associated with ion-

induced point defects. The broad photoluminescence bands observed at high-temperature annealing stages $\sim 600\text{--}900^\circ\text{C}$ are attributed to radiative recombination at dislocations.

Key words: silicon; implantation; photoluminescence; defects; dislocations.

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, при создании наноструктур Ge/Si с квантовыми точками Ge на монокристаллическом кремнии используются разные технологии, целью которых является достижение однородности по размерам, форме, составу и пространственному упорядочению квантовых точек Ge с контролируемым расстоянием между ними [1–3]. Исследования показали, что наибольшие успехи в создании упорядоченных nanoостровков Ge могут быть достигнуты за счет наноструктурирования поверхности кремния с использованием наноимпринт-литографии и ионного облучения, электронно-лучевой литографии, литографии с помощью интерференции ультрафиолетовых лучей, голографии и др. [1, 2]. Установлено, что использование низкоэнергетического ионного воздействия в процессе осаждения nanoостровков Ge сопровождается образованием дефектов в квантовых точках Ge и в приповерхностных областях на границе раздела Si и Ge [1, 3]. В связи с этим возникает необходимость детального изучения природы ионно-индуцированных дефектов при создании наноструктур Ge/Si с квантовыми точками Ge для достижения наиболее эффективной излучательной рекомбинации в инфракрасной области спектра $\sim 1.5\text{ мкм}$. В настоящей работе изложены новые данные по сравнительному анализу процессов излучательной рекомбинации в монокристаллическом Si, имплантированном ионами кремния и германия и подвергнутого термическому отжигу в широком интервале температур.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Исследовался монокристаллический кремний p-типа проводимости, легированный бором и облученный ионами Si^+ или ионами Ge^+ с энергией 80 кэВ и дозой $\sim 10^{15}\text{ см}^{-2}$. Изохорный отжиг имплантированных образцов проводился в интервале температур от 25 до 900°C и длительности ~ 20 минут в условиях высокого вакуума. Спектры фотolumинесценции регистрировались с помощью дифракционного монохроматора МДР-23У, оснащенного решеткой 600 штр./мм (обратная линейная дисперсия $26\text{ \AA/мм}$). В качестве детектора оптических сигналов использовался InGaAs p-i-n фотодиод типа G8370-03 (фирма «Hamamatsu», Япония). Для возбуждения люминесценции использовался диодный лазерный модуль, работающий на длине волны $\sim 405\text{ нм}$ с мощностью до 100 мВт.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунках 1 и 2 приведены спектры фотolumинесценции (ФЛ) монокристаллов кремния, имплантированных ионами Si и Ge, соответственно, с энергией $\sim 80\text{ кэВ}$ и дозой $\sim 10^{15}\text{ см}^{-2}$. Спектры ФЛ снимались на различных стадиях отжига образцов в температурном интервале $25\text{--}900^\circ\text{C}$.

В спектрах ФЛ исходного, имплантированного и термически обработанного Si в области энергий $\sim 1.15\text{--}1.02\text{ эВ}$ наблюдаются узкие линии, обусловленные рекомбинацией экситонов, связанных на атомах бора, как основной легирующей примеси. Слабоинтенсивная высокоэнергетическая линия с максимумом $\sim 1.150\text{ эВ}$ обусловлена излучательной рекомбинацией свободных экситонов, происходящей без уча-

ствия фононов. Линии с максимумами 1.132 эВ и 1.092 эВ обусловлены излучательной рекомбинацией экситонов, связанных на атомах бора, с участием поперечных акустических фононов с энергией ТА ~ 18 мэВ и поперечных оптических фононов с энергией ТО ~ 58 мэВ. Две линии с максимумами 1.061 эВ и 1.029 эВ обусловлены рекомбинацией связанных экситонов и одновременным участием нескольких фононов [4]. В спектрах ФЛ обоих типов образцов на стадиях термического отжига $\leq 500^\circ\text{C}$ наблюдаются электронно-колебательные полосы с головными бесфононными линиями А ~ 0.970 эВ, С ~ 0.789 эВ, W ~ 1.019 эВ, X ~ 1.040 эВ и Р ~ 0.767 эВ.

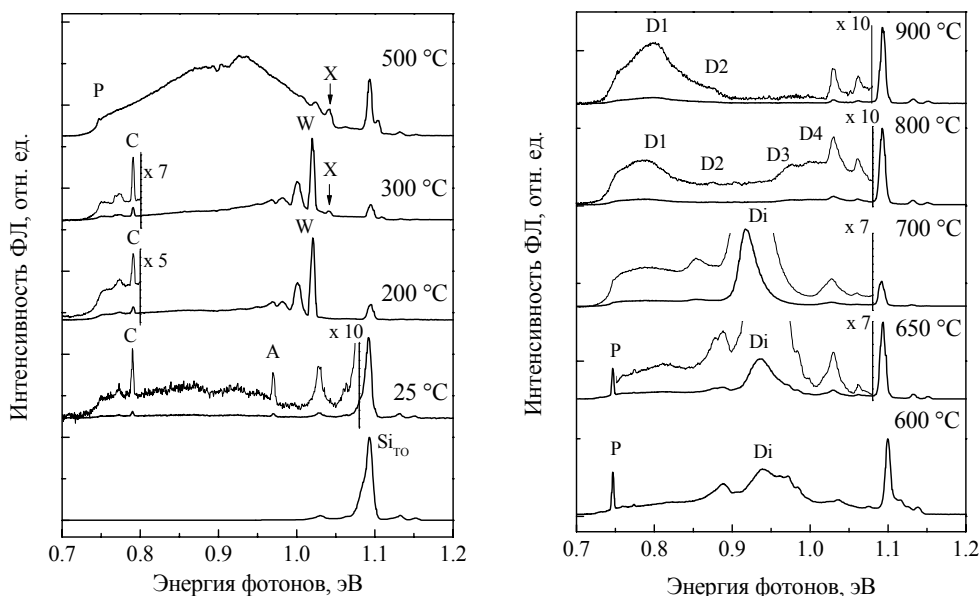


Рисунок 1. – Спектры ФЛ необлученного кремния, облученного при 25°C ионами Si^{+} с энергией 80 кэВ и дозой $\sim 10^{15} \text{ см}^{-2}$ и отожженного при различных температурах

Как было установлено ранее, бесфононные линии А, С, W, X и Р обусловлены излучательной аннигиляцией экситонов, связанных с дефектами структуры точечного типа, которые образуются при различных типах радиационного воздействия (электроны, гамма-кванты, ионы и др.) [4–6]. Для всех бесфононных линий характерно наличие длинноволнового структурированного крыла, максимумы которого могут быть отнесены к излучению локализованных экситонов с участием в процессах рекомбинации фононов кристаллической решетки, в частности ТА, ТО и др., а также локальных и (или) квазилокализованных фононов в зависимости от химического состава и особенностей локальных колебаний соответствующих центров излучательной рекомбинации.

Ранее было установлено, что в состав ионно-индуцированных дефектов А, С и Р входят атомы кислорода и (или) углерода, как остаточные технологические примеси в Si, а в состав центров W – междоузельные атомы Si [4] или междоузельные атомы Si и атомы водорода [7]. В состав дефектов, ответственных за появление полосы X, входят вакансии [4, 6]. На высокотемпературных стадиях отжига имплантированного Si $\sim 600\text{--}900^\circ\text{C}$ проявляется широкая полоса Di с максимумом ~ 0.93 эВ. Максимум

этой полосы смещается в область низких энергий до ~ 0.92 эВ с повышением температуры отжига. Близкая по энергетическому положению к этому значению полоса ФЛ наблюдалась ранее и была отнесена к излучательной рекомбинации неравновесных носителей заряда на дислокационных петлях Франка, локализованных вблизи границ поликристаллических зерен кремния [8].

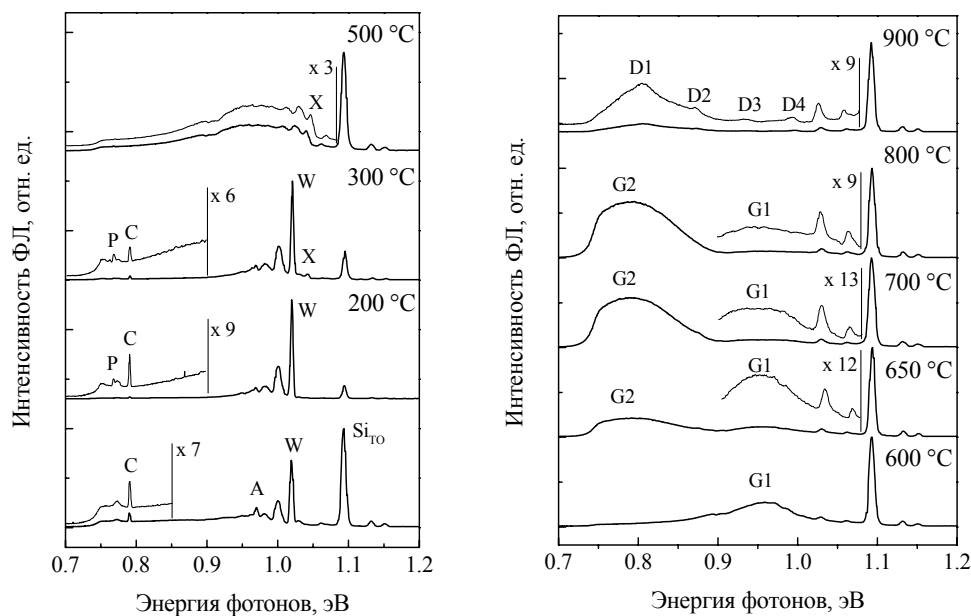


Рисунок 2. – Спектры ФЛ кремния, облученного при 25 °С ионами Ge^+ с энергией 80 кэВ и дозой $\sim 10^{15} \text{ см}^{-2}$ и отожженного при различных температурах

При более высоких температурах отжига $\sim 800\text{--}900$ °С в спектрах ФЛ проявляются полосы, связанные с дислокациями D1 ~ 0.81 эВ, D2 ~ 0.87 эВ, D3 ~ 0.93 эВ и D4 ~ 1.00 эВ [9]. Наиболее важным отличием имплантации ионов Ge, рисунок 2, по сравнению с внедрением ионов Si, рисунок 1, является наличие широких полос G1 ~ 0.97 эВ и G2 ~ 0.79 эВ на высокотемпературных стадиях отжига. По нашему предположению, атомы Ge образуют скопления и подавляют процесс образования дислокаций типа D1 – D4 на стадиях отжига имплантированного Si $\sim 600\text{--}800$ °С. Возможно на этих стадиях отжига происходит замещение Si в узлах кристаллической решетки атомами Ge, что приводит к увеличению локальных напряжений и изменению электронной структуры, что замедляет процесс зарождения дислокаций.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установлено, что имплантация ионов кремния или германия в монокристаллический кремний и последующий термический отжиг образцов до температур ≤ 700 °С приводит к образованию различных по химическому составу центров излучательной рекомбинации, включающих в свой состав в большинстве случаев атомы кислорода и углерода, как остаточные технологические примеси. На высокотемпературных стадиях отжига $\sim 600\text{--}900$ °С обнаружены интенсивные полосы фотолюминесценции,

связанные с излучательной рекомбинацией на дислокациях, характерных для пластически деформированного кремния. В спектрах фотолюминесценции монокристаллов кремния, имплантированных ионами германия, обнаружены интенсивные широкие полосы, обусловленные излучательной рекомбинацией на скоплениях атомов германия. Это важно для объяснения природы инфракрасной люминесценции наноструктур Ge/Si с квантовыми точками Ge, создаваемыми с использованием ионной имплантации в процессе их роста.

Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект Ф18Р-038), Российского фонда фундаментальных исследований (грант «Бел_а» № 18-52-00014) и Гос. задания – 0306-2016-0015.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Brehm, M. Site-controlled and advanced epitaxial Ge/Si quantum dots: fabrication, properties, and applications / M. Brehm, M. Grydlik // *Nanotechnology*. – 2017. – Vol. 28. – P. 392001 (22 pp).
2. Chains of quantum dot molecules grown on Si surface pre-patterned by ion-assisted nanoimprint lithography / Zh. V. Smagina [et. al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2015. – Vol. 105, No 15. – P.153106 (4 pp).
3. Линейные цепочки квантовых точек Ge/Si при росте на структурированной поверхности, сформированной ионными облучением / Ж. В. Смагина [и др.] // *ФТП*. – 2015. – Т. 49, №6. – С. 767–771.
4. Davies, G. The optical properties of luminescence centres in silicon / G. Davies // *Physics Reports*. – 1989. – Vol. 176, No 3. – P.83–188.
5. Tkachev, V.D. Noble gas atoms as chemical impurities in silicon / V.D. Tkachev, A.V. Mudryi, N.S. Minaev // *Phys. Stat. Sol. (a)*. – 1984. – Vol. 81, No 1. – P. 313–321.
6. Мудрый, А.В. Влияние кислорода и вида облучения на спектры примесной люминесценции кремния / А.В. Мудрый, А.В. Юхневич // *ФТП*. – 1973. – Е7, №1. – С. 170–172.
7. A luminescence study of defects and internal strains in ion-implanted silicon on sapphire films/ A.V. Mudryi [et al.]// *Mater. Chem. Phys.* – 1996. – Vol. 45. – P. 185–188.
8. Properties of strong luminescence at 0.93 eV in solar grade silicon / C. Krause [et. al.] // *Solid State Phenomena*. – 2014. – Vol. 206 – 206. – P. 83–88.
9. Drozdov, N.A. Recombination radiation on dislocations in silicon / N.A. Drozdov, A.A. Patrin, V.D. Tkachev // *JETP Lett.* – 1976. – Vol. 23. – P. 597–599.

FIRST PRINCIPLES STUDY OF POINT DEFECTS IN BULK AND MONOLAYER MOLYBDENUM DISULFIDE

J. V. Gusakova¹, V. E. Gusakov², B. K. Tay^{1,3}

¹⁾ Novitas Center, Nanyang Technological University, 50 Nanyang Avenue, 639798 Singapore, Singapore, e-mail: julia001@e.ntu.edu.sg;

²⁾ Scientific-Practical Materials Research Center of NAS of Belarus, 19 P. Brovki, 220072 Minsk, Belarus, e-mail:gusakov@ifftp.bas-net.by

³⁾ CINTRA UMI CNRS/NTU/THALES, 50 Nanyang Drive, 637553 Singapore, Singapore, e-mail: ebktay@ntu.edu.sg

Corresponding author: V. E. Gusakov (gusakov@ifftp.bas-net.by)

The study of formation and diffusion of point defects in bulk and monolayer MoS₂ is presented. First the formation of a split Frenkel pair was calculated. The formation energy of the split Frenkel pair in monolayer MoS₂ is 5.79 eV PZ LDA (5.58 eV PBE GGA) and in bulk MoS₂ is 8.43 eV PZ LDA (8.14 eV PBE GGA). The calculated diffusion barrier of