- GraphAne: From Synthesis to Applications / Sahin H., Leenaerts O., Singh S. K., Peeter F. M. // Materials Science. – 2015. – P. 1 – 15.
- Ab-initio simulations of deformation potentials and electron mobility in chemically modified graphene and two dimensional hexagonal boron-nitride / Bruzzone S., Fiori G. // Appl. Phys. Lett. 2011. V. 99. P. 22108.
- QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Chiarotti G. L., Cococcioni M., Dabo I. et al // J.Phys.: Condens. Matter. – 2009. – V.21, P. 395502.
- EPW: Electron–phonon coupling, transport and superconducting properties using maximally localized Wannier functions / Poncé S., Margine E. R., Verdi C. // Computer Physics Communications. – 2016. – V. 209. – P. 116 – 133.
- 7. Определение интенсивностей рассеивания электронов в одиночном слое графена / В.В. Муравьев, В.Н. Мищенко // Доклады БГУИР. 2017. № 6 (108). С. 128—129.

# ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ НАНОСТРУКТУР Ge/Si С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ Ge

А. В. Мудрый<sup>1</sup>, В. Д. Живулько<sup>1</sup>, О. М. Бородавченко<sup>1</sup>, А. В. Гацак<sup>1</sup>, В. А. Зиновьев<sup>2</sup>, Ж. В. Смагина<sup>2</sup>, А. Ф. Зиновьева<sup>2</sup>, А. В. Двуреченский<sup>2</sup>

<sup>1)</sup> Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению, ул. П. Бровки, 19, 220072 Минск, Беларусь; e-mail: mudryi@physics.by <sup>2)</sup> Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, ул. Академика Лаврентьева, 13, 630090 Новосибирск, Россия; e-mail: zinoviev@isp.nsc.ru

При температуре 4,2 К исследована фотолюминесценция многослойных наноструктур Ge/Si с квантовыми точками Ge, созданными при обычной молекулярнолучевой эпитаксии и эпитаксии из ионно-молекулярных пучков Ge<sup>+</sup>. Установлено, что облучение ионами Ge<sup>+</sup> в процессе зарождения наноостровков Ge на Si приводит к увеличению интенсивности полосы фотолюминесценции в области энергии ~ 0,81 эВ и стабилизации ее спектрального положения. Обсуждается возможный механизм излучательной рекомбинации носителей заряда в наноструктурах Ge/Si с квантовыми точками Ge.

*Ключевые слова:* молекулярно-лучевая эпитаксия; наноструктуры Ge/Si; квантовые точки Ge; фотолюминесценция

# PHOTOLUMINESCENCE OF Ge/Si NANOSTRUCTURES WITH GE QUANTUM DOTS

A. V. Mudryi<sup>1</sup>, V. D. Zhivulko<sup>1</sup>, O. M. Borodavchenko<sup>1</sup>, A. V. Hatsak<sup>1</sup>, V. A. Zinovyev<sup>2</sup>, Zh. V. Smagina<sup>2</sup>, A. F. Zinovieva<sup>2</sup>, A. V Dvurechenskii<sup>2</sup>

<sup>1)</sup>Scientific-Practical Materials Research Centre of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
2) Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, SB RAS, Novosibirsk, Russia
Corresponding author: V. D. Zhivulko (zhivulko@physics.by)

The photoluminescence of multilayer Ge/Si nanostructures with Ge quantum dots produced by conventional molecular-beam epitaxy and epitaxy from  $Ge^+$  ion-molecular beams was been studied at a temperature 4.2 K. It has been found that the irradiation with  $Ge^+$  ions during the nucleation of Ge nanoislands on Si leads to an increase in the intensity of the photoluminescence band in the energy region ~ 0.81 eV and stabilization of its spectral position. A possible mechanism of radiative recombination of charge carriers in Ge/Si nanostructures with Ge quantum dots is discussed.

*Key words*: molecular-beam epitaxy; Ge/Si nanostructures; Ge quantum dots; photoluminescence.

### введение

Развитие полупроводниковой оптоэлектроники на основе наноструктур Ge/Si с квантовыми точками Ge (КТ Ge), создаваемых на монокристаллическом Si с использованием метода молекулярно-лучевой эпитаксии, вызывает повышенный интерес исследователей благодаря их уникальным физическим характеристикам и возможности создания светоизлучающих наноструктур и фотоприемников для ближней инфракрасной области спектра 1–5 мкм [1–3]. Недавно было показано, что низкоэнергетическое (≤ 3 кэВ) облучение ионами Ge<sup>+</sup> при молекулярно-лучевой эпитаксии КТ Ge на Si приводит к увеличению их плотности, уменьшению средних размеров и дисперсии по размерам в сравнении с наноструктурами Ge/Si с КТ Ge. создаваемыми без облучения ионами  $Ge^+[1, 4]$ . Установлено, что ионное облучение в процессе эпитаксии увеличивает интенсивность фотолюминесценции от наноостровков Ge в инфракрасной области спектра ~ 1,3-1,6 мкм за счет образования точечных дефектов структуры (расщепленных в направлении [110] междоузельных атомов Ge) [1]. Особо значимой является технология наноимприт-литографии, позволяющая с использованием ионных пучков  $Ge^+$  создавать упорядоченные наноостровки Ge, которые являются основой зарождения КТ Ge при последующей молекулярно-лучевой эпитаксии [5]. Поэтому значительный интерес представляет установление природы дефектов структуры, образуемых при воздействии низкоэнергетических ионов  $Ge^+$  в области границы раздела в наноструктурах Ge/Si, а также определение механизмов излучательной рекомбинации носителей заряда в области интерфейса КТ Ge/Si.

# МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Исследования проводились на двух типах наноструктур Ge/Si с квантовыми точками Ge (КТ Ge), созданными методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках Si с ориентацией (001), легированных бором (КДБ-100). На первой стадии проводилось снятие окисного слоя с поверхности Si подложки с использованием ионного распыления. Буферный слой Si с толщиной ~ 100 нм осаждался при повышенной температуре методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Затем на буферном слое Si при температуре T ~ 500 °C формировался слой Ge с толщиной ~ 5,5 MC (1 MC = 1,41 Å), который закрывался при температуре 600 °С слоем Si с толщиной 15 нм. В наноструктурах Ge/Si создавалось десять слоев Ge, разделенных слоями Si. Затем при повышенной температуре T ~ 600 °C формировался закрывающий слой Si с толщиной 40 нм (образец 1). Второй тип образцов создавался аналогичными способом, только во время осаждения нанослоев Ge дополнительно проводилась имплантация ионов Ge<sup>+</sup> с низкой энергией ~ 2 кэВ (образец 2). Измерение спектров фотолюминесценции (ФЛ) наноструктур Ge/Si проводилось при температуре жидкого гелия ~ 4,2 К в специальном оптическом криостате. Для возбуждения люминесценции использовались лазеры, работающие на длине волны 405 нм и 532 нм с мощностью до 200 мВт. Измерение спектров ФЛ проводилось на дифракционном монохроматоре МДР-23У, обеспечивающим обратную линейную дисперсию 26 Å/мм. Оптические сигналы детектировались фотоприемником на основе InGaAs p-i-n фотодиода типа G8370-03 (фирма «Hamamatsu», Япония), работающим при комнатной температуре в спектральной области 0,5–1,7 мкм.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1, а и рис. 1, б представлены спектры ФЛ наноструктур Ge/Si с КТ Ge, созданных без облучения (образец 1) и с применением частичной ионизации пучков ионов Ge<sup>+</sup> при эпитаксиальном росте КТ Ge (образец 2), соответственно. Как видно на рис. 1, в области энергий >1,02 эВ в спектрах  $\Phi Л$  присутствуют узкие линии  $BE_{NP} \sim$ 1,150 эВ и ВЕ<sub>ТА</sub> ~ 1,132 эВ, ВЕ<sub>ТО</sub> ~ 1,192 эВ, обусловленные бесфононной излучательной аннигиляцией связанных экситонов на атомах легирующей примеси (бор) в подложке Si, а также линии BE<sub>TA</sub> и BE<sub>TO</sub>, обусловленные аннигиляцией связанных экситонов с одновременным участием поперечных акустических фононов с энергией TA ~ 18 мэВ, и поперечных оптических фононов с энергией TO ~ 58 мэВ, соответственно. Широкие полосы с максимумами  $QD \sim 0.90$  эВ и  $QD1 \sim 0.81$  эВ в области энергий < 1.0 эВ обусловлены излучательной рекомбинацией на КТ Ge с различными размерами в наноструктурах Ge/Si. Полоса QD может быть отнесена к непрямой излучательной рекомбинации электронов, локализованных в наноразмерных слоях Si, с дырками, локализованными в КТ Ge. Широкая полоса OD1 ~ 0.81 эВ с большей интенсивностью может быть отнесена к излучательной рекомбинации электронов с дырками в КТ Ge в условиях наличия дефектов структуры и упругих напряжений в области границы интерфейса Ge/Si [1, 5, 6]. Как видно на рис. 16, облучение ионами Ge<sup>+</sup> при эпитаксиальном росте КТ Ge приводит к увеличению интенсивности полосы QD1 ~ 0.81 эВ в 4 раза. Эксперименты по облучению ионами Ge<sup>+</sup> с энергией ~ 2 кэВ при эпитаксиальном росте КТ Ge показали, что из-за образования дефектов структуры полуширина полосы QD1 увеличивается и ее максимум на 7 мэВ смещается в высокоэнергетическую область, а полоса QD ~ 0,90 эВ не наблюдается в спектрах  $\Phi \Pi$ , рис. 1, *б*.



Рисунок 1. Зависимость спектров фотолюминесценции наноструктур Si/Ge с квантовыми точками Ge от плотности мощности лазерного излучения на длине волны λ = 405 нм (*a* – без облучения, образец 1; *б* – с облучением, образец 2)

На рис. 2, *a* (образец 1) и рис. 2*б* (образец 2) представлены спектры ФЛ наноструктур Ge/Si с KT Ge, зарегистрированные при температуре жидкого гелия и возбуждении неравновесных носителей заряда лазерным излучением на длине волны 532 нм.



Рисунок 2. Зависимость спектров фотолюминесценции наноструктур Si/Ge с квантовыми точками Ge от плотности мощности лазерного излучения на длине волны λ = 532 нм (*a* – без облучения, образец 1; *б* – с облучением, образец 2)

Как видно из сравнительного анализа рис. 2 и рис. 1, из-за большей глубины проникновения лазерного излучения при длине волны 532 нм в наноструктурах Ge/Si с КТ Ge по сравнению с длинной волны 405 нм в спектрах ФЛ доминирующим по интенсивности становится излучение в области энергий > 1,0 эВ от подложки и разделяющих слоев Si. Это указывает на перераспределение каналов излучательной рекомбинации неравновесных носителей заряда. При этом полоса QD1 ~ 0,81 эВ не изменяет своего спектрального положения, а полоса с максимумом QD ~ 0,90 эВ не проявляется в спектрах ФЛ наноструктур Ge/Si с КТ Ge.

Отметим, что в наноструктурах Ge/Si, облученных ионами Ge<sup>+</sup> при эпитаксиальном росте KT Ge, при возбуждении неравновесных носителей заряда лазерным излучением на длине волны 532 нм интенсивность полосы фотолюминесценции QD1 ~ 0,81 эВ в 3 раза больше по сравнению с образцами без ионного облучения, рис. 2.

На рис. За и рис. Зб представлены сравнительные зависимости интегральной интенсивности полосы фотолюминесценции QD1 от плотности мощности в диапазоне от 0,05  $BT/cm^2$  до 4,00  $BT/cm^2$  для лазеров с различной длиной волны 405 нм и 532 нм, соответственно.

Эксперименты показали, что зависимость интенсивности полосы QD1 от плотности мощности возбуждения P описывается выражением I ~  $P^k$ , где коэффициент k = 0,50–0,56 (образец 1) и k = 0,61–0,65 (образец 2) составили для лазеров с длиной волны 405 нм и 532 нм, соответственно. Эти данные демонстрируют увеличение коэффициента k для полоса QD1 ~ 0,81 эВ для наноструктур Ge/Si, облученных ионами Ge<sup>+</sup> при эпитаксиальном росте KT Ge, образец 2, рис. 3. В дополнение к этому установлено, что для образца 1 не облученного ионами Ge<sup>+</sup> при увеличении плотности мощности лазерного излучения в диапазоне от 0,05 BT/см<sup>2</sup> до 4,00 BT/см<sup>2</sup> максимум полосы QD1 смещается в высокоэнергетическую область на ~ 12–15 мэВ, рис. 1, *а* и рис. 2, *а*. Это указывает на значительный разброс энергетических уровней, участвующих в процессах излучательной рекомбинации в наноструктурах Ge/Si с KT Ge, т.е. наличие флуктуаций электростатического потенциала на границе интерфейса KT Ge – разделительные слои Si. Эксперименты показали, что в наноструктурах Ge/Si, облученных ионами Ge<sup>+</sup> при эпитаксиальном росте KT Ge, смещения максимума полосы QD1 ~ 0,81 эВ в диапазоне плотности мощности лазерного излучения 0,05 BT/cm<sup>2</sup> – 4,00 BT/cm<sup>2</sup> не происходит. Это указывает на то, что дефекты структуры, создаваемые при облучении ионами Ge<sup>+</sup> во время эпитаксиального роста KT Ge при температуре  $T \sim 500$  °C и последующей их кристаллизации в процессе формирования разделительных слоев Si с толщиной 15 нм при более высокой температуре  $T \sim 600$  °C, значительно снижают величину флуктуаций электростатического потенциала на границе KT Ge с разделительными слоями Si. При этом можно также предположить, что облучение ионами Ge<sup>+</sup> во время эпитаксиального роста KT Ge приводит к снижению концентрации дефектов, являющихся центрами безызлучательной рекомбинации.



Рисунок 3. Зависимость интегральной интенсивности полосы QD1 от плотности мощности лазерного излучения 405 нм (*a*) и 532 нм (*б*) двух образцов наноструктур Si/Ge с квантовыми точками Ge

Как известно, полоса фотолюминесценции QD1 ~ 0,81 эВ приписывается непрямой рекомбинации с участием двух типов носителей – электрона, локализованного в слое Si, и дырки, локализованной в квантовых точках Ge [6, 7]. Физически это означает, что из-за расщепления зоны проводимости электроны в слоях Si локализуются в минимумах долины Д2, образованной за счет деформаций растяжения вблизи границы интерфейса КТ Ge/разделительные слои Si. Силами кулоновского взаимодействия электроны связываются с дырками, локализованными в КТ Ge, образуя экситоны. Оптические переходы  $\Delta_2$  – hh (подзона тяжелых дырок) происходят с участием фононов и поэтому являются непрямыми. Недавно было показано, что полоса в области энергий ~ 0.8 эВ обусловлена прямой излучательной рекомбинацией дырок в КТ Ge с электронами на энергетических уровнях дефектов структуры точечного типа (расщепленные – [110] междоузельные атомы Ge), образуемых в КТ Ge при низкоэнергетическом облучении ионами Ge<sup>+</sup> [1, 4]. На основании исследований, проведенных в настоящей работе, предполагается, что полоса фотолюминесценции QD1 появляется за счет излучательной рекомбинации носителей заряда на интерфейсе 2-го типа: КТ Ge / разделительные слои Si с участием дефектов структуры в Si.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наноструктуры Ge/Si, содержащие до 10 чередующихся наноразмерных слоев Si и Ge, созданные методом молекулярно-лучевой эпитаксии с использованием частичной ионизации молекулярных пучков (облучение ионами Ge<sup>+</sup> при эпитаксии квантовых точек Ge), обладают интенсивной фотолюминесценцией в ближней инфракрасной области спектра ~ 1,4–1,7 мкм. Установлено, что интенсивность полосы фотолюминесценции в области энергии ~ 0,8 эВ в наноструктурах Ge/Si с квантовыми точками Ge, сформированными с использованием ионизации пучков ионов Ge<sup>+</sup> при эпитакси-альном росте КТ Ge, в 3–4 раза превышает интенсивность аналогичных наноструктур Ge/Si с квантовыми точками Ge, созданными без облучения. Преимущество использования ионно-молекулярных пучков при эпитаксии состоит также в стабилизации спектрального положения излучения в инфракрасной области спектра ~ 0,8 эВ.

Работа выполнена по программе ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии», подпрограмма 8.2 (задание 2.2.1).

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

- 1. Brehm M. Site-controlled and advanced epitaxial Ge/Si quantum dots: fabrication, properties, and applications / M. Brehm, M. Grydlik // Nanotechnology. 2017. V. 28. P. 392001-1–392001-22.
- 2. Photoluminescence of compact GeSi quantum dot groups with increased probability of finding an electron in Ge / A.F. Zinovieva [et. al.] // Scientific Reports. 2020. V. 10. P. 9308-1–9308-8.
- Near-infrared photoresponse in Ge/Si quantum dots enhanced by localized surface plasmons supported by aluminium nanodiscs / A.I. Yakimov [et. al.] // J. Appl. Phys. 2020. V. 128, № 14. P. 143101-1–143101-9.
- Lasing from glassy quantum dots in crystalline Si / M. Grydlik [et. al.] // ACS Photonics. –2016. V.3. – P. 298–303.
- 5. Nucleation and epitaxial growth of Ge nanoislands on Si surface pre-patterned by ion irradiation / J.V. Smagina [et. al.] // Phys. Status Solidi A. 2013. Vol. 210, № 8. P. 1522–1524.
- 6. [6] Light-emitting tunneling nanostructures based on quantum dots in Si and GaAs / V. G. Talalaev [et. al.] // Semiconductors. 2012. V. 46, № 11. P. 1460–1470.
- 7. Self-assembling SiGe and SiGeC nanostructures for light emitters and tunneling diodes / K. Eberl [et. al.] // Thin Solid Films. 2000. V. 369. P. 33–38.

## ЗАВИСИМОСТЬ ИК-ПОГЛОЩЕНИЯ СТРУКТУРЫ Si/SiO<sub>2</sub>/Si ОТ УРОВНЯ ЛЕГИРОВАНИЯ Si -СЛОЕВ

## А. И. Мухаммад, П. И. Гайдук

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь, e-mail: rct.muhammadAII@bsu.by

Методом конечных разностей во временной области получены спектры поглощения инфракрасного излучения для структур Si/SiO<sub>2</sub>/Si с поверхностным островковым Si-слоем различного типа и уровня легирования. Обнаружено, что при легировании островкового слоя от  $3 \times 10^{19}$  см<sup>-3</sup> до  $8 \times 10^{19}$  см<sup>-3</sup> ширина полосы с интенсивностью поглощения выше 70% в спектре поглощения структуры Si/SiO<sub>2</sub>/ $n^+$ -Si составила более 16 мкм. Показано, что структура с подложкой *p*-типа, легированной до  $5 \times 10^{19}$  см<sup>-3</sup> и островковым Si-слоем *n*-типа, легированным до  $7 \times 10^{19}$  см<sup>-3</sup> поглощает более 75% падающего на него излучения в диапазоне 4–20 мкм. Установлено, что использование в качестве островкового слоя как нелегированного кремния, так и ма-