

УДК 539.12.04:621.382

ВЛИЯНИЕ РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ ОБЛАСТЕЙ НА ОПТОЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ОБЛУЧЕННЫХ БЫСТРЫМИ НЕЙТРОНАМИ ГЕТЕРОСТРУКТУР С НАНООСТРОВКАМИ Ge/Si

© 2020 г. А. В. Скупов^{а, *}, С. В. Оболенский^{а, б}

^аФилиал РФЯЦ-ВНИИЭФ “Научно-исследовательский институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова”,
Нижний Новгород, 603951 Россия

^бНижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, 603950 Россия

*e-mail: skav10@mail.ru

Поступила в редакцию 15.01.2020 г.

После доработки 17.02.2020 г.

Принята к публикации 19.02.2020 г.

Показано, что концентрация разупорядоченных областей (кластеров радиационных дефектов), возникающих при облучении полупроводников нейтронами с флюенсом $10^{13}–10^{15}$ см⁻², на порядок меньше, чем объемная концентрация наноструктур Ge/Si в современных многослойных гетероструктурах с их планарными массивами. Упругие деформации кристаллической решетки вокруг разупорядоченных областей в разы меньше, чем деформации вокруг наноструктур Ge/Si, определяющих их оптоэлектронные свойства. При облучении современных гетероструктур с массивами наноструктур Ge/Si нейтронами с флюенсом 10^{15} см⁻² в область пространственного заряда множества разупорядоченных областей попадают до 40% наноструктур. Сделан вывод, что деградация оптоэлектронных свойств облученных нейтронами гетероструктур с наноструктурами Ge/Si обусловлена преимущественно влиянием на кинетику носителей заряда вблизи наноструктур уровней энергии радиационных дефектов в запрещенной зоне и электрических полей разупорядоченных областей.

Ключевые слова: оптоэлектронные приборы, гетероструктуры, наноструктуры Ge/Si, радиационная стойкость, облучение нейтронами, радиационные дефекты, разупорядоченные области.

DOI: 10.31857/S1028096020110163

ВВЕДЕНИЕ

Для применения оптоэлектронных приборов на основе наноразмерных гетероструктур в условиях воздействия ионизирующих излучений необходимо обеспечить радиационную стойкость их электрических, оптических и других физических свойств. Поэтому является актуальным исследование радиационных эффектов, приводящих к деградации свойств гетероструктур при воздействии различных видов ионизирующих излучений [1, 2].

В настоящей работе анализируется влияние на физические свойства гетероструктур с наноструктурами Ge/Si разупорядоченных областей (РО) — одного из видов радиационных дефектов, возникающих в полупроводниках при облучении нейтронами, протонами и электронами (с энергией более 10 МэВ) [3–5]. Характерный размер ядра РО составляет 10 нм, ядро образовано материалом с концентрацией дефектов кристаллической структуры порядка $10^{19}–10^{20}$ см⁻³. РО окружена

областью пространственного заряда, протяженность которой может превышать 100 нм.

Изучение свойств наноструктур Ge/Si представляет интерес, поскольку на основе их многослойных массивов в перспективе возможно создание светоизлучающих и фотоприемных устройств, совместимых с технологией кремниевой микроэлектроники, и работающих в диапазоне длин волн 1.3–1.5 мкм, характерном для современных оптоволоконных линий связи [6, 7]. Наноструктуры Ge/Si формируются посредством самоорганизации по механизму Странского–Крастанова в процессе молекулярно-пучковой эпитаксии. В работах [6, 7] получены наноструктуры в форме пирамид (hut-кластеры) высотой 1.5–1.7 нм и длиной основания 10–15 нм, имеющие выраженный дискретный спектр энергий электронов и дырок (квантовые точки). Поверхностная плотность таких наноструктур составляет 3×10^{11} см⁻². В работах [8, 9] получены куполообразные наноструктуры (dome-кластеры) Ge/Si вы-

сотой 10–12 нм, размером в плоскости основания 65–75 нм и поверхностной плотностью 10^{10} см^{-2} . В зависимости от условий роста могут быть получены наноструктуры высотой от 2 до 45 нм, диаметром от 30 до 250 нм и плотностью 4.0×10^8 – $1.5 \times 10^{11} \text{ см}^{-3}$ [10, 11]. На основе многослойных массивов наноструктур Ge/Si созданы оптоэлектронные приборы [6–9], их параметры исследуются, в том числе и после радиационных воздействий [8, 9].

Цель настоящей работы – теоретическое исследование влияния на оптоэлектронные свойства многослойных массивов наноструктур Ge/Si разупорядоченных областей, возникающих при облучении гетероструктур быстрыми нейтронами.

1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Экспериментально установлено, что при облучении протонами (нейтронами, электронами) ряд физических свойств трехмерных нановключений в гетероструктурах на основе твердых растворов InAs/GaAs, Ge/Si подвержены деградации в меньшей степени, чем аналогичные свойства квантовых ям. В работах [8, 9, 12, 13] это установлено по изменениям спектров фото- и электролюминесценции (ФЛ и ЭЛ). Большая по сравнению с квантовыми ямами радиационная стойкость свойств наноструктур обусловлена их малыми геометрическими размерами и трехмерной пространственной локализацией носителей заряда в них. Поэтому полезные для практического использования свойства наноструктур в меньшей степени, чем свойства квантовых ям, подвержены влиянию неизбежно возникающих при облучении радиационных дефектов. Тем не менее, интенсивность ФЛ и ЭЛ многослойных массивов наноструктур уменьшается с увеличением интегрального потока воздействующего излучения.

Влияние радиационных точечных дефектов кристаллической структуры (комплексов вакансий, междоузельных атомов, атомов примеси) на оптоэлектронные свойства наноструктур аналогично влиянию дефектов, возникающих в процессе выращивания гетероструктур. Такие дефекты создают в запрещенной зоне полупроводников уровни энергии, через которые происходит рекомбинация носителей заряда. Концентрация носителей в разрешенных зонах уменьшается, и, как следствие, уменьшается интенсивность их взаимодействия с наноструктурами. В то же время происходит туннелирование носителей заряда с энергетических уровней в наноструктурах на уровни дефектов в запрещенной зоне с их последующей безызлучательной рекомбинацией [12, 14].

Процессы, происходящие при образовании РО, и их влияние на электрофизические свойства полупроводников подробно изучались ранее [3–5]. Входящие в состав РО дефекты выступают как центры захвата и рекомбинации носителей заряда. При возникновении значительной концентрации РО в полупроводнике уменьшаются время жизни и концентрация носителей заряда. В отличие от радиационных точечных дефектов, РО представляют собой трехмерные включения, деформирующие кристаллическую решетку [15] и создающие в ней протяженное электрическое поле [5]. В то же время установлено, что свойства наноструктур определяются упругими напряжениями, модифицирующими зонную структуру вблизи них, и кулоновским взаимодействием носителей заряда [6]. В результате образования значительной концентрации РО происходит суперпозиция как упругих напряжений, так и электрических полей от нескольких РО. Наноструктуры могут попасть в область действия этих полей, что может привести к изменениям оптоэлектронных свойств наноструктур и радиационной деградации параметров оптоэлектронных приборов на их основе. Этот аспект влияния РО на свойства гетероструктур с наноструктурами в литературе не рассматривался. Ниже приведены численные оценки, характеризующие степень значимости эффектов, связанных с образованием РО в гетероструктурах с наноструктурами.

В работе [9] рассматривалась вероятность попадания РО (кластера радиационных дефектов) в наноструктуру в зависимости от флуенса нейтронов, воздействующего на гетероструктуру, при этом упругие напряжения и электрические поля РО не учитывались. В [13] высказано предположение, что экспериментально наблюдаемые изменения оптических свойств облученных нейтронами гетероструктур с квантовыми ямами InGaAs/AlGaAs связано с изменением амплитуды упругих напряжений в них. Таким образом, исследование влияния упругих и электрических напряжений, создаваемых РО, на свойства наноразмерных гетероструктур актуально для интерпретации экспериментальных данных. В [16] показано, что вероятность образования радиационных дефектов в наноструктурах при облучении нейтронами спектра деления урана мала (дефекты образуются в 3–6% наноструктур от общего числа в многослойной гетероструктуре), однако РО рассматривались не как трехмерные кластеры радиационных дефектов, а как совокупность радиационных точечных дефектов. Настоящая работа является продолжением работы [16].

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим РО, возникающие при облучении быстрыми нейтронами, для определенности в

дальнейшем. В разделе 2.1 приведены оценки концентрации наностроек Ge/Si в гетероструктурах, описание которых приведено в литературе, и их соотношение с концентрацией РО, возникающих при имеющих место в экспериментах флюенсах нейтронов. В разделе 2.2 рассчитана амплитуда деформаций кристаллической решетки, создаваемых РО, и проведено сравнение ее с деформациями вблизи наностроек Ge/Si. В разделе 2.3 рассчитан потенциал электрического поля РО и протяженность области пространственного заряда вокруг нее. В разделе 2.4 проанализированы некоторые механизмы влияния РО на оптоэлектронные свойства наностроек Ge/Si.

2.1. Зависимость от флюенса нейтронов

Среднюю концентрацию РО можно оценить в приближении однократного упругого рассеяния нейтрона на ядрах атомов в объеме полупроводниковой структуры по формуле $N_{DR} = \sigma(E_n)N_{at}F_n$, где $\sigma(E_n)$ – сечение взаимодействия нейтрона с энергией E_n с веществом, N_{at} – концентрация атомов, F_n – флюенс нейтронов. Согласно [17], для кремния $\sigma(E_n)$ варьируется от 1 до 10 барн в интервале энергий E_n от 0.1 до 10 МэВ, среднее сечение составляет 2 барна. Концентрация атомов кремния $N_{at} = 5 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Среднее расстояние между РО можно вычислить по формуле $L_{DR} = (3/(4\pi N_{DR}))^{1/3}$. На рис. 1 приведены зависимости N_{DR} и L_{DR} от F_n для $\sigma(E_n)$, равных 1, 2 и 10 барн. Дальнейшие расчеты проведены для среднего значения сечения $\sigma(E_n) = 2$ барн.

Концентрация наностроек в многослойной гетероструктуре из их планарных массивов может быть оценена по формуле $N_{is} = N_s n/d$, где N_s – поверхностная плотность наностроек, n – число слоев, d – толщина гетероструктуры с наностройками. Среднее расстояние между наностройками $L_{is} \approx (N_{is})^{1/3}$. Результаты расчетов для гетероструктур, полученных в работах [7, 9], представлены в табл. 1.

Из приведенных на рис. 1 и в табл. 1 данных видно, что значения N_{DR} и N_{is} имеют один и тот же порядок ($\approx 10^{15} \text{ см}^{-3}$) лишь при максимальном флюенсе нейтронов ($F_n \approx 10^{15} \text{ см}^{-2}$). При таком флюенсе нейтронов $L_{DR} \approx 0.1\text{--}0.2 \text{ мкм}$, с учетом радиуса РО (около 10 нм [5, 18]) в массивах наиболее крупных наностроек (высотой до 12 нм, размером в плоскости основания до 75 нм [9]) возможно прямое попадание РО в наностройки ($L_{is} \approx 0.15 \text{ мкм}$, табл. 1). Поскольку РО – устойчивый радиационный дефект, обладающий спектром уровней энергии в запрещенной зоне, это приведет к нарушению процессов генерации и рекомбинации носителей заряда в наностройках.

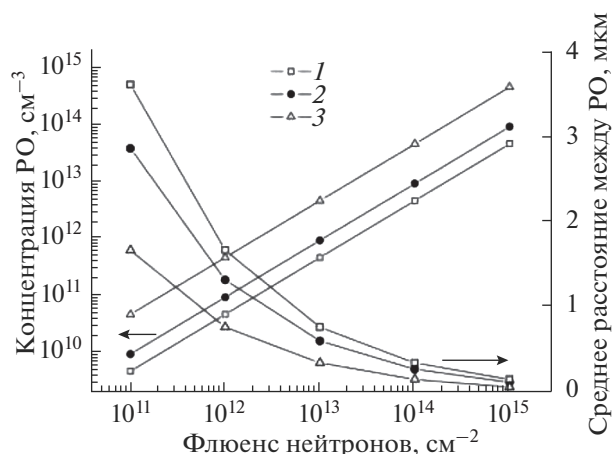


Рис. 1. Зависимость средней концентрации РО (N_{DR}) и среднего расстояния (L_{DR}) между ними от флюенса нейтронов для сечений их взаимодействия с ядрами атомов кремния, барн: 1 – 1, 2 – 2, 3 – 10.

ках, сопровождающихся поглощением и испусканием фотонов, и исключению вклада этих наностроек в ФЛ и ЭЛ. При флюенсах нейтронов менее 10^{15} см^{-2} вследствие значительно меньшей средней концентрации возникающих РО (при $F_n = 10^{14} \text{ см}^{-2}$, $N_{DR} = 10^{13} \text{ см}^{-3}$) деградация оптоэлектронных свойств массивов наностроек ($N_{is} \geq 10^{14} \text{ см}^{-3}$) в результате прямого попадания РО в наностройки маловероятна. То же справедливо и для более плотных массивов наностроек высотой 1.5 нм и размером в плоскости основания 15 нм [7]. Среднее расстояние между ними в разы меньше, чем среднее расстояние между РО, поэтому даже при максимальном флюенсе нейтронов (10^{15} см^{-2}) большая часть наностроек в гетероструктуре не будет повреждена образованием РО.

2.2. Упругие деформации вблизи разупорядоченной области

Упругие деформации, создаваемые в кристаллической решетке РО, можно оценить, используя следующую модель. Предположим, что РО представляет собой сферу радиусом R_1 , равным 10 нм [5, 18]. По оценкам [15] в момент окончания динамической стадии развития каскада атомных

Таблица 1. Параметры массивов наностроек приборных гетероструктур [7, 9]

$N_s, \text{см}^{-2}$	n	$d, \text{нм}$	$N_{is}, \text{см}^{-3}$	$L_{is}, \text{нм}$
3×10^{11}	36	1.1×10^3	9.8×10^{16}	22
10^{10}	20	6.4×10^3	3.1×10^{15}	68
10^9	20	6.4×10^3	3.1×10^{14}	147

смещений, в результате которого возникает РО, давление P_1 в окружающей его кристаллической решетке достигает значения 10^9 Па. Компоненты тензора деформаций вокруг РО можно получить, используя решение задачи о распределении деформаций по толщине шарового слоя, внутри которого действует давление P_1 , а снаружи давление равно нулю [19]. В сферической системе координат, центр которой совпадает с центром РО, компоненты тензора деформации выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{rr} &= -2b/r^3, \\ \varepsilon_{\theta\theta} &= \varepsilon_{\varphi\varphi} = b/r^3, \\ b &= R_1^3 P_1 (1 + \nu)/2E.\end{aligned}$$

Подставляя в эти формулы значения упругих постоянных для кремния (в приближении изотропного кристалла согласно справочным данным [20], коэффициент Пуассона $\nu = 0.21$, модуль Юнга $E = 171.8$ ГПа), получим, что величина ε_{rr} не превышает 0.7×10^{-2} вблизи поверхности РО ($R \approx R_1$). Полученные значения деформации — оценка сверху, поскольку на стадии аккомодации РО к окружающей кристаллической решетке давление P_1 внутри нее становится меньше принятого в расчетах значения.

Упругие деформации вокруг наноструктур обусловлены рассогласованием постоянных кристаллических решеток материала, из которого они состоят, и материала, в объем которого они встроены. Для гетероструктур Ge/Si это рассогласование равно $(a_{Si} - a_{Ge})/a_{Si} = 4.2 \times 10^{-2}$, где a_{Si} , a_{Ge} — постоянные решеток кремния (0.543 нм) и германия (0.566 нм) соответственно [20]. Пространственное распределение деформаций вокруг наноструктуры Ge/Si в форме пирамиды высотой 1.5 нм и длиной основания 15 нм рассчитано в работе [21]: характерная величина тензора деформаций составляет $(0.5-1.0) \times 10^{-2}$ и уменьшается практически до нуля на расстоянии ≥ 5 нм от поверхности наноструктуры. Амплитуда деформаций, создаваемых наноструктурой Ge/Si в форме усеченной пирамиды, аппроксимирующей домен-кластер высотой 10 нм и длиной стороны основания 70 нм [8, 9], была рассчитана в прямоугольных координатах по формулам из работы [22]. Амплитуда деформаций составляет $(2.5-6.5) \times 10^{-2}$.

Из сравнения приведенных выше значений упругих деформаций от РО и наноструктур Ge/Si, полученных экспериментально гетероструктур, следует, что максимальная амплитуда деформаций от РО в разы меньше деформаций от наноструктуры. Деформации от РО спадают по закону $\sim 1/r^3$ и на расстоянии ≥ 20 нм от воображаемой поверхности РО практически равны нулю.

Следовательно, с учетом среднего расстояния между наноструктурами (≥ 22 нм, табл. 1) и среднего расстояния между РО (≥ 200 нм при $F_n = 10^{15}$ см $^{-2}$, рис. 1), деформации от РО не могут существенно повлиять на распределение деформаций от большого числа наноструктур в гетероструктуре и модифицировать их зонную структуру, определяющую оптические и электронные свойства.

2.3. Электрическое поле разупорядоченной области

Концентрация радиационных дефектов (N_2) в ядре РО (ди- и тетравакансий, комплексов точечный дефект—примесь и др.) по оценкам может достигать $10^{19}-10^{20}$ см $^{-3}$ [5, 15, 18]. На уровне энергии в запрещенной зоне этих дефектов захватываются носители заряда, РО заряжается, электрическое поле создает изгиб дна зоны проводимости и потолка валентной зоны. Величина потенциального барьера в кремнии n -типа проводимости при комнатной температуре может достигать $\varphi_c = 0.24$ эВ [18]. Следуя модели Госсика [5] можно получить выражение для потенциала электрического поля РО:

$$\varphi(r) = \frac{N_2 e}{6\epsilon\epsilon_0} (3R_2^2 - r^2 - 2R_2^3/r), \quad (1)$$

где R_2 — граница области пространственного заряда, окружающей РО, ϵ и ϵ_0 — относительная (для кремния $\epsilon = 12$) и абсолютная диэлектрические проницаемости, e — заряд электрона. R_2 определяется из уравнения (1) при условии $\varphi(R_1) = \varphi_c$. В собственном полупроводнике φ_c можно вычислить по формуле $\varphi_c = E_g/2 - (E_v + 0.39)$, где E_g — ширина запрещенной зоны кремния, $E_v + 0.39$ — положение закрепленного в РО уровня Ферми в облученном собственном кремнии (за начало отсчета энергии принято положение потолка валентной зоны) [18]. Таким образом, при $\varphi_c = 0.17$ эВ и $R_1 = 10$ нм $R_2 = 150$ нм.

В современных гетероструктурах размеры наноструктур Ge/Si и толщины разделяющих их планарные массивы слоев составляют единицы и десятки нм, следовательно, электрическое поле одной РО может влиять на свойства нескольких наноструктур внутри сферы радиусом R_2 . Число таких наноструктур в активной области приборных гетероструктур можно оценить по формуле $n_{is} = 4\pi R_2^3 N_s n / 3d$ (обозначения введены выше). Для фотодетектора с наиболее плотным массивом наноструктур (табл. 1), описанного в работе [7], $N_s = 3 \times 10^{11}$ см $^{-2}$, $n = 36$, $d = 1.1 \times 10^{-4}$ см и $n_{is} = 1350$ шт.

Как следует из рис. 1, при $F_n = 10^{14}$ см $^{-2}$, $N_{DR} = 10^{13}$ см $^{-3}$ среднее расстояние между РО L_{DR} составляет 300–400 нм. Таким образом, протяжен-

ность области пространственного заряда (ОПЗ) вокруг соседних РО составляет $2R_2 \leq L_{DR}$, поэтому при флюенсах нейтронов $F_n \geq 10^{14} \text{ см}^{-2}$ будет происходить суперпозиция электрических полей от нескольких РО. Была вычислена доля находящихся в ОПЗ РО наностроек от их полного числа в гетероструктуре: $w = N_{DR}(F_n)n/N_{is} \times 100\%$. Зависимость величины w от флюенса нейтронов представлена на рис. 2. Область действия электрического поля РО ограничивалась сферой радиусом 100 нм (как будет показано ниже, его влияние на зонную структуру наностроек наиболее существенно в пределах этого расстояния от ее центра). Видно, что электрические поля множества РО оказывают влияние на 4% наностроек в многослойной гетероструктуре при флюенсе нейтронов 10^{14} см^{-2} , доля наностроек возрастает до 40% при $F_n = 10^{15} \text{ см}^{-2}$.

Электрическое поле и рекомбинация носителей заряда на радиационных дефектах РО вызывает диффузионно-дрейфовое перераспределение носителей заряда в ОПЗ. В результате изменяются и абсолютная концентрация, и соотношение концентраций электронов и дырок вблизи наностроек, находящихся в ОПЗ РО. Изменения концентрации носителей заряда вблизи РО повлекут за собой изменения интенсивности оптических переходов в наностройках, попавших в их ОПЗ.

2.4. Влияние разупорядоченных областей на оптоэлектронные свойства наностроек

Гетероструктуры Ge(Si)/Si(001) образуют гетеропереходы второго типа [6]. Если размеры наностройки Ge/Si малы [6], то в них проявляются эффекты размерного квантования энергии носителей заряда. Наностройки — потенциальная яма для дырок, поэтому спектр их энергии дискретен. Под действием упругих деформаций и кулоновского притяжения электронов дырками в наностройке дно зоны проводимости кремния вблизи него образует треугольную потенциальную яму для электронов. Глубина ямы в вертикально упорядоченном массиве КТ составляет 0.1 эВ [23]. Установлено, что поглощение и испускание фотонов наностройками Ge/Si, обладающими дискретным спектром энергии носителей заряда, определяется экситонами и экситонными комплексами. При фотогенерации электронно-дырочной пары дырка локализуется внутри наностройки, а электрон локализован в потенциальной яме в зоне проводимости вблизи него.

В работе [24] исследования межзонных оптических переходов в наностройках Ge/Si в электрическом поле проведены методом токовой спектроскопии. При малых величинах электрического поля на спектрах наблюдается пик фототока симметричной формы, связанный с непря-

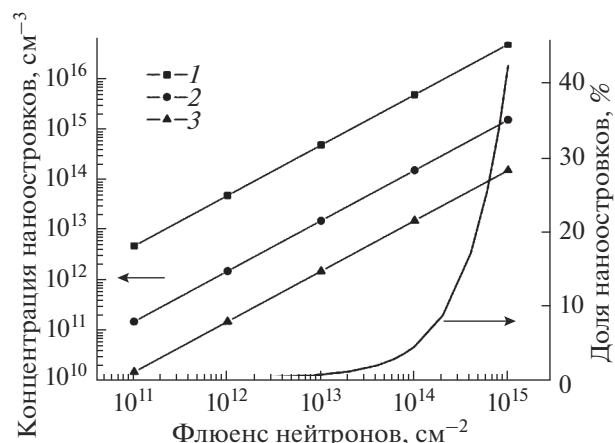


Рис. 2. Зависимости концентрации наностроек в многослойном массиве, находящихся в ОПЗ РО, от флюенса нейтронов. Расчет выполнен для различных поверхностных плотностей наностроек и числа слоев в гетероструктуре (табл. 1): 1 — $3 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, 36 слоев; 2 — 10^{10} см^{-2} , 20 слоев; 3 — 10^9 см^{-2} , 20 слоев.

мым экситонным переходом между основным состоянием дырки в Ge и электрона в Si. С возрастанием величины электрического поля ширина пика фототока увеличивается, и пик расщепляется на две составляющие. Полученные результаты объясняются тем, что дипольные моменты образовавшихся в наностройке экситонов противоположным образом ориентируются по отношению к направлению приложенного электрического поля. Для одного из диполей внешнее поле способствует увеличению перекрытия волновых функций электрона и дырки, росту энергии связи экситона и смещению пика спектра фототока в область больших энергий оптических переходов. В диполе противоположного направления перекрытие волновых функций будет ослабляться, что приведет к уменьшению энергии связи и смещению пика в область меньших энергий. Напряженность электрического поля в эксперименте [24] достигала 100 кВ/см.

По формуле (1) можно оценить напряженность электрического поля от РО: $E = -dU/dr \approx -(\phi(r_a) - \phi(r_b))/|r_a - r_b|$, где r_a, r_b — расстояния от центра РО до вершины и основания наностройки Ge/Si. В качестве характерного расстояния изменения потенциала электрического поля примем высоту наностройки Ge/Si $h: |r_a - r_b| = h = 1.5 \text{ нм}$, тогда $U = \phi(r_a) - \phi(r_b) \approx 0.006 \text{ В}$. Напряженность электрического поля на расстоянии 20 нм от центра РО составит $\sim 40 \text{ кВ/см}$. Но при этом наностройки Ge/Si окажутся на разных расстояниях от РО, электрическое поле которой будет иметь различную напряженность и в разной степени изменять их экситонный спектр. Поэтому экспериментально может наблюдаться лишь увеличение ширины спектральных пиков фототока или фо-

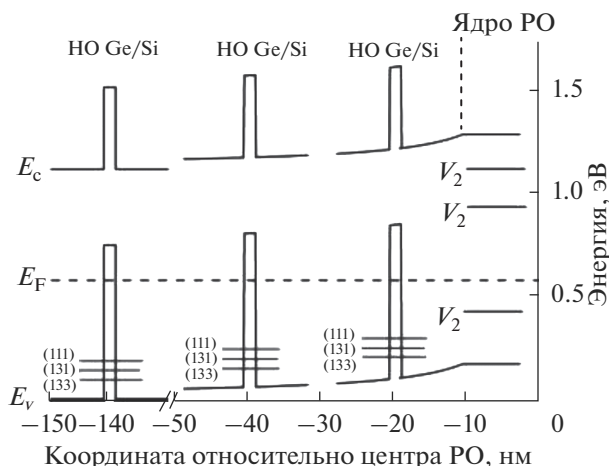


Рис. 3. Зонная диаграмма кремния с наноструктурой (НО) Ge/Si и РО при расстояниях 20, 40, 140 нм между их центрами. E_{111} , E_{131} , E_{133} — энергии основного состояния дырок в квантовой яме НО, V_2 — уровни дивакансий ($E_c = 0.23$, $E_v = 0.39$, $E_F = 0.19$ эВ), E_F — уровень Ферми.

толюминесценции от наноструктур Ge/Si облученных гетероструктур с РО.

В электрическом поле возможна также диссоциация экситонов, если энергия входящих в его состав носителей, превышает энергию связи экситона. Для наноструктур Ge/Si энергия связи экситона, образованного находящимися в основном состоянии электроном и дыркой, составляет 38 мэВ [6]. Энергия, приобретаемая электроном и дыркой в поле РО, равна qU , где U — разность потенциалов на расстоянии, равном радиусу экситона. Учитывая пространственное распределение волновых функций носителей в наноструктуре Ge/Si [6], в качестве радиуса экситона можно принять высоту наноструктуры h . Используя вычисленное ранее значение разности потенциалов электрического поля РО между вершиной и основанием наноструктуры, $U = \phi(r_a) - \phi(r_b)$, расположенной на расстоянии 20 нм от центра РО, получим, что энергия, приобретаемая электроном и дыркой экситона, составляет 6 мэВ. Таким образом, действие электрического поля РО не приводит к диссоциации экситонов вблизи наноструктуры Ge/Si.

В наноструктурах Ge/Si малых размеров проявляются свойства, характерные для квантовых точек. Положение уровней энергии основного состояния дырки (E_{111} , E_{131} , E_{133}) в таких наноструктурах может быть оценено по модели “квантового ящика” с бесконечными стенками [25]. Эта модель обеспечивает хорошее согласие результатов расчета с экспериментальными данными. Наноструктура пирамидальной формы заменяется эффективным параллелепипедом с размерами h (высота пирамиды) и a (длина основания) соот-

ветственно в направлении роста и в плоскости роста. Тогда положение уровней энергии может быть вычислено по формуле [25]:

$$E_{nmk} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n^2}{h^2} + \frac{m^2}{a^2} + \frac{k^2}{a^2} \right), \quad (2)$$

где $n, m, k = 1, 2, 3 \dots$ — квантовые числа, $m^* = 0.3m_0$ — эффективная масса тяжелых дырок в Ge (m_0 — масса свободного электрона). Для расчета использовались следующие значения геометрических размеров наноструктуры: $a = 15$ нм, $h = 1.5$ нм, глубина квантовой ямы в валентной зоне 0.75 эВ, высота барьера в зоне проводимости 0.4 эВ [26].

На рис. 3 представлена зонная диаграмма кремния с проводимостью, близкой к собственной с РО, и наноструктурой Ge/Si для трех возможных конфигураций их расположения: расстояние между их геометрическими центрами составляет $L_1 \geq R_2$, $L_2 = 20$ нм, $L_3 = 40$ нм. За ноль отсчета энергии принято положение потолка валентной зоны в кристалле без РО. Положение зон рассчитывалось по формуле: $E_{c(v)}(x) = E_{c(v)}^0 - e\phi(x)$, где $E_{c(v)}^0$ — положение зоны проводимости (валентной) кремния, $\phi(x)$ — потенциал электрического поля РО (рассчитан по формуле (1)). При L_1 влияние электрического поля на наноструктуру пренебрежимо мало. При L_2 и L_3 сдвиг уровней энергии основного состояния дырок в наноструктуре равен сдвигу дна квантовой ямы. Поэтому уровни энергии E_{111} , E_{131} , E_{133} при L_2 и L_3 смещаются относительно своего положения при L_1 на ту же величину, что и дно “квантового ящика”. На рис. 3 показаны также уровни энергии дивакансий (V_2) — основного дефекта в ядре РО [3, 4].

Радиационные дефекты в РО неоднородно распределены вокруг ее центра [5, 18]. Поэтому возможны такие пространственные конфигурации дефектов и наноструктуры, при которых расстояние между ними будет меньше 10 нм, и будет возможно туннелирование носителей с уровня размерного квантования на уровни радиационных дефектов с последующей их безызлучательной рекомбинацией. Рекомбинация носителей заряда на радиационных дефектах разупорядоченных областей приведет также к возникновению диффузионного потока носителей к РО. Часть этих носителей может попадать в наноструктуру, находящуюся вблизи РО, и рекомбинировать в них с испусканием фотонов. Возможно, этим объясняется возрастание интенсивности люминесценции от наноструктур при малых флюенсах, воздействующих на гетероструктуры корпускулярных излучений [13, 27]. При возрастании флюенса излучений и накоплении радиационных дефектов в объеме гетероструктур рекомбинация носителей через их уровни в запре-

щенной зоне становится доминирующим механизмом удаления носителей заряда.

Результаты выполненных теоретических исследований в настоящее время не имеют прямого экспериментального подтверждения, в том числе и известными из литературы данными. Однако, сделанные оценки согласуются с результатами экспериментальных исследований по облучению гетероструктур с наноструктурами Ge/Si [8, 9]. В этих работах установлено, что интенсивность сигнала ФЛ- и ЭЛ-гетероструктур с наноструктурами сохраняется даже при воздействии нейтронов с флуенсом 10^{15} см^{-2} , поскольку сохраняется некоторая доля наноструктур без радиационных дефектов в объеме и с неискаженной электрическим полем РО (согласно приведенным выше оценкам до 60%) спектром энергии носителей заряда.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам анализа влияния упругих деформаций и электрического поля разупорядоченных областей, возникающих при облучении гетероструктур быстрыми нейтронами (протонами, электронами), на оптоэлектронные свойства наноструктур Ge/Si можно сделать следующие выводы.

1. Средняя концентрация разупорядоченных областей, возникающих в кремниевых гетероструктурах при облучении быстрыми нейтронами с флуенсом $10^{13}–10^{15} \text{ см}^{-2}$, более чем на порядок величины меньше, чем концентрация наноструктур в экспериментально полученных гетероструктурах Ge/Si. Поэтому возникновение разупорядоченных областей в объеме наноструктур, приводящее к деградации их оптоэлектронных свойств, маловероятно.

2. Упругие деформации кристаллической решетки, вызванные образованием РО, из-за малой величины ($\sim 0.7 \times 10^{-2}$ вблизи РО) слабо влияют на деформации вокруг наноструктур Ge/Si ($\sim 4.2 \times 10^{-2}$) и, как следствие, на определяемые ими оптоэлектронные свойства (спектр энергии носителей заряда и др.).

3. Концентрация возникших в каскадах атомных смещений РО при флуенсах нейтронов $10^{11}–10^{15} \text{ см}^{-2}$ составляет $10^{10}–10^{14} \text{ см}^{-3}$ соответственно. Электрические поля множества РО оказывают влияние на 4% наноструктур Ge/Si (от их полного числа в многослойной гетероструктуре) при флуенсе нейтронов 10^{14} см^{-2} , доля наноструктур возрастает до 40% при возрастании флуенса до 10^{15} см^{-2} .

4. Электрическое поле РО изменяет положение дна зоны проводимости и потолка валентной зоны в гетероструктурах с наноструктурами Ge/Si.

Вместе с уровнями разрешенных зон на величину разности потенциалов между РО и невозмущенным кристаллом смещаются и уровни размерного квантования энергии наноструктур, расположенных в радиусе 100–150 нм от РО. Это приведет к изменению энергии оптических переходов в наноструктурах вблизи РО на величину до 0.17–0.24 эВ.

5. При образовании РО в запрещенной зоне кремния возникает спектр уровней радиационных дефектов (дивакансий, комплексов точечный дефект–атом примеси). Их положение таково, что возможен обмен носителями заряда посредством туннелирования между уровнями дефектов и разрешенными зонами энергии (или уровнями размерного квантования) наноструктур Ge/Si, находящихся в радиусе около 10 нм от РО. Этот процесс может сопровождаться безызлучательной рекомбинацией носителей заряда через уровни радиационных дефектов и деградацией оптоэлектронных свойств гетероструктур.

6. Электрическое поле РО создает в зоне проводимости барьер для электронов и “яму” для дырок в валентной зоне и, как следствие, области обеднения электронами и обогащения дырками. Поэтому вблизи наноструктур, находящихся в радиусе 100–150 нм от РО, изменяется концентрация носителей заряда в зонах и эффективность их захвата в наноструктуры. Электрическое поле и рекомбинация носителей заряда на радиационных дефектах РО вызывает диффузионно-дрейфовое перераспределение носителей заряда в ОПЗ РО. В результате изменяются и абсолютная концентрация, и соотношение концентраций электронов и дырок вблизи наноструктур Ge/Si, находящихся в ОПЗ РО. Изменения концентрации носителей заряда вблизи РО повлекут за собой изменения интенсивности оптических переходов в наноструктурах, попавших в их ОПЗ.

Для дальнейшего уточнения сделанных в работе теоретических оценок целесообразно рассмотреть диффузионное перераспределение радиационных точечных дефектов в объеме наноструктур и вокруг них с учетом действующих в гетероструктуре полей упругих напряжений. Следует учесть, что рост наноструктур Ge(Si)/Si(001) происходит когерентно, без образования дефектов кристаллической структуры на границе раздела, поэтому притянутые к ней радиационные дефекты будут рекомбинировать только между собой или образовывать вблизи нее устойчивые комплексы дефектов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа частично поддержана грантом Российского научного фонда № 18-13-00066.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Герасименко Н.Н., Смирнов Д.И. // Нано- и микро-системная техника. 2008. № 9. С. 2.
2. Sobolev N.A. // Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 47. № 2. С. 182.
3. Козлов В.А., Козловский В.В. // Физика и техника полупроводников. 2001. Т. 35. № 7. С. 769.
4. Ермолов П., Карманов Д., Лефлат А., Мананков В., Меркин М., Шабалина Е. // Физика и техника полупроводников. 2002. Т. 36. № 10. С. 1194.
5. Новиков В.А., Пешев В.В. // Физика и техника полупроводников. 1998. Т. 32. № 4. С. 411.
6. Двуреченский А.В., Якимов А.И. // Физика и техника полупроводников. 2001. Т. 35. № 9. С. 1143.
7. Якимов А.И., Двуреченский А.В., Никифоров А.И., Чайковский С.В., Тийс С.А. // Физика и техника полупроводников. 2003. Т. 37. № 11. С. 1383.
8. Новиков А.В., Яблонский А.Н., Платонов В.В., Оболенский С.В., Лобанов Д.Н., Красильник З.Ф. // Физика и техника полупроводников. 2010. Т. 44. № 3. С. 346.
9. Красильник З.Ф., Кудрявцев К.Е., Качемцев А.Н., Лобанов Д.Н., Новиков А.В., Оболенский С.В., Шенгуров Д.В. // Физика и техника полупроводников. 2011. Т. 45. № 2. С. 230.
10. Larsson M., Elfving A., Ni W.X., Hansson G.V., Holtz P.O. // Phys. Rev. B. 2006. V. 73. P. 195319. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.195319>
11. Miesner C., Rothig O., Brunner K., Abstreiter G. // Physica E. 2000. V. 7. P. 146.
12. Marcinkievicius S., Sigert J., Leon R., Cechayicius B., Magness B., Taylor W., Lobo C. // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 235314. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.235314>
13. Байдусь Н.В., Вихрова О.В., Звонков Б.Н., Малышева Е.И., Труфанов А.Н. // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49. № 3. С. 370.
14. Игнатъев И.В., Козин И.Э. Динамика носителей в полупроводниковых квантовых точках. СПб, 2005. 126 с.
15. Артемьев В.А., Михнович В.В. // Физика и техника полупроводников. 1986. Т. 20. № 1. С. 167.
16. Скупов А.В. // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49. № 5. С. 634.
17. National Nuclear Data Center (NNDC). <http://www.nndc.bnl.gov>
18. Васильев А.В., Изтелеулов М.И., Смагулова С.А., Смирнов Л.С. // Физика и техника полупроводников. 1985. Т. 19. № 11. С. 2073.
19. Ландау Л.Д., Теоретическая физика. В 10-ти томах. Т. VII. Теория упругости. 4-е изд. М.: Наука, 1987. 248 с.
20. Францевич И.Н. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Справочник. Киев: Наукова Думка, 1982. 286 с.
21. Nenashv A.V., Dvurechenskii A.V. // JETP. 2000. V. 91. № 3. P. 497.
22. Pearson G.S., Faux D.A. // J. Appl. Phys. 2000. V. 88. № 2. P. 730. <https://doi.org/10.1063/1.373729>
23. Якимов А.И., Двуреченский А.В., Блошкин А.А., Ненашев А.В. // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т. 83. № 4. С. 189.
24. Двуреченский А.В., Якимов А.И., Ненашев А.В., Зиновьева А.Ф. // ФТТ. 2004. Т. 46. № 1. С. 60.
25. Талочкин А.Б., Чистохин И.Б. // ЖЭТФ. 2011. Т. 140. № 3. С. 583.
26. El Kurdi M., Sauvage S., Fishman G., Boucaud P. // Phys. Rev. B. 2006. V. 73. P. 195327. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.195327>
27. Leon R., Swift G.M., Magness B., Taylor W.A., Tang Y.S., Wang K.L., Dowd P., Zhang Y.H. // Appl. Phys. Lett. 2000. V. 76. P. 2074. <https://doi.org/10.1063/1.126259>

Disordered Regions Influence on Optoelectronic Properties of Heterostructures with Ge/Si Nanoislands Irradiated by Fast Neutrons

A. V. Skupov^{1, *}, S. V. Obolenskiy^{1, 2}

¹Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute of Experimental Physics”
“Research Institute of Measuring Systems named after Yu. Ye. Sedakov”, Nizhny Novgorod, 603951 Russia

²Lobachevsky Nizhny Novgorod State University, Nizhny Novgorod, 603950 Russia

*e-mail: skav10@mail.ru

It is presented, that concentration of disordered regions (radiation defects clusters) formed during irradiation of semiconductors by neutrons of fluence $10^{13} - 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, is just an order less than volume concentration of Ge/Si nanoislands in modern multilayered heterostructures having their planar arrays. Elastic strain of crystal lattice around disordered regions is several times less than the elastic strain around of Ge/Si nanoislands defining their optoelectronic properties. Irradiation of modern heterostructures by neutrons of fluence 10^{15} cm^{-2} causes that up to 40% of nanoislands are within the range of volume charge set resulted from disordered regions. It is concluded, that degradation of optoelectronic properties of heterostructures with Ge/Si nanoislands irradiated by neutrons is mostly caused by influence on charge carrier kinetics close to nanoislands of radiation defects energy levels in band gap and electric field set of disordered regions.

Keywords: optoelectronic device, heterostructure, nanoislands Ge/Si, radiation hardness, neutron irradiation, radiation defect, disordered region.